

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Simulação computacional do processo de produção de raios-x para uso diagnóstico por método Monte Carlo utilizando o código PENELOPE.

Aderaldo Irineu Levartoski de Araujo

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de Mestre em Física.

FLORIANÓPOLIS
2005

Agradecimentos

Aos meus pais e familiares pelo apoio e incentivo.

Ao Prof. Dr. Danilo Paiva Almeida pela orientação, à Prof. Dra. Patrícia Nicolucci pelos esclarecimentos e ao Prof. Dr. Mohammad Reza Ay pela colaboração.

Aos amigos, funcionários e professores do Departamento de Física da UFSC pela rica convivência.

À Capes pelo suporte financeiro.

Índice

Resumo.....	vi
<i>Abstract</i>	vii
Introdução.....	01
1 Fundamentos Teóricos.....	05
1.1 Interações de elétrons e fótons com a matéria.....	05
1.1.1 Interações eletrônicas.....	05
Espalhamento elástico.....	06
Espalhamento inelástico.....	06
a) Excitação de fônons.....	07
b) Excitação de elétrons secundários.....	07
c) Ionização de camadas internas.....	07
d) Elétrons Auger.....	08
e) Catodoluminescência.....	09
f) Emissão <i>bremsstrahlung</i>	09
g) Aniquilamento de pósitrons.....	10
1.1.2 Interações fotônicas.....	10
Espalhamento Rayleigh ou coerente.....	11
Espalhamento Compton ou incoerente.....	12
Absorção Fotoelétrica.....	12
Produção de pares.....	13
1.2 Simulação de Monte Carlo.....	14
1.2.1 Variáveis estocásticas.....	15

1.2.2 Médias estatísticas e incertezas.....	17
1.2.3 Redução Variacional.....	18
1.2.4 Geração de caminhos aleatórios.....	19
1.3 Simulação mista ou de classe II para elétrons.....	25
1.3.1 Espalhamento elástico de elétrons e modelo MW.....	27
1.3.2 Espalhamento inelástico de elétrons e modelo GOS.....	33
1.4 Simulação do espectro de emissão de raios-x.....	33
1.4.1 Ionização de camadas internas por impacto eletrônico.....	35
1.4.2 Emissão <i>bremsstrahlung</i>	36
1.4.3 Relaxamento de átomos excitados.....	38
1.4.4 Atenuação de raios-x pela matéria.....	41
1.5 Características do espectro de raios-x.....	42
1.6 Efeito anódico.....	44
2 Materiais e métodos.....	45
2.1 Estrutura do pacote de distribuição do código PENELOPE.....	45
2.2 Estrutura e funcionamento do código PENELOPE.....	48
2.2.1 Base de dados e arquivo de dados dos materiais.....	50
2.2.2 Estrutura do código do usuário (programa MAIN).....	51
2.2.3 Redução variacional.....	60
2.3 Exemplos de programas MAIN.....	61
2.3.1 Programa PENSLAB.....	61
2.3.2 Programa PENCYL.....	64
2.3.3 Programa PENDOSES.....	65
2.3.4 Programa PENGEOM.....	66

2.2.5 Programa SHOWER.....	70
2.3 Ampola geradora de raios-x.....	72
2.4 Arranjo experimental simulado.....	74
2.5 Edição do programa MAIN.....	77
3 Resultados e discussões.....	79
4 Conclusões.....	93
Referências bibliográficas.....	96

Resumo

A simulação do espectro de raios-x para tubos operando em energias usadas em diagnósticos médicos foi obtida através da modelagem computacional baseada no método Monte Carlo. As propriedades físicas das interações dos elétrons primários foram discutidas. O código computacional PENELOPE simula o transporte de elétrons e fótons em materiais arbitrários, permitindo o armazenamento das histórias individuais da radiação ionizante através do alvo.

Foi discutido o problema de se obter uma descrição acurada dos feixes de fótons produzidos por impacto eletrônico em um alvo pesado envolvendo como ocorre em tubos de raios-x. A viabilidade do código PENELOPE é analisada em detalhes e a interação tanto de elétrons como de fótons de raios-x com diferentes materiais é também discutida.

Os espectros de raios-x foram simulados para várias condições diagnósticas envolvendo a geometria, material absorvedor, energia de impacto dos elétrons e fluência em fótons. Como conclusão, regiões de altas e baixas energias podem ser propriamente representadas pelo código PENELOPE. As linhas de emissão características $K_{\alpha,\beta}$ e L associadas com o material do ânodo foram também corretamente descritas. Comparações com outro código de simulação e com resultados experimentais sustentam o uso do código PENELOPE.

Finalmente, a fluência em fótons foi calculada em função da alta tensão aplicada no tubo de raios-x em um simulador de paciente. Estes valores podem ser úteis na predição da dose efetiva de radiação no paciente.

Palavras-chave: raios-x; radiodiagnóstico; simulação computacional; PENELOPE.

Abstract

The x-ray spectra simulation for tubes operating at diagnostic medical energies have been obtained through a Monte Carlo based computational modeling. Physical properties for the interaction of the primary electron have been exposed. The computer code system PENELOPE simulates the transport of electrons and photons in arbitrary materials, allowing to store the individual histories of the ionizing radiation passing the target.

The problem of providing accurate prediction for the photons beams following the electron impact on a heavy target which occurs in x-ray tube is discussed. The feasibility for the PENELOPE computational code is analysed in details, and the interaction of both electrons and x-ray photons on different materials is also discussed.

The x-ray spectra have been simulated for several diagnostic conditions concerning geometry, absorber material, electron impact energy and photon fluency. At conclusions, regions at low and high energy can be usefully represented by the PENELOPE code. The characteristic $K_{\alpha,\beta}$ and L emission lines associated with the anode have also been well described. Comparison with other simulation code as well as with experimental results support the PENELOPE code use.

Finally, the photon fluence was calculated as a function of applied x-ray tube high voltage in a phantom. These values may be useful for predicting the effective radiation dose on the patient.

Keywords: x-ray; radiodiagnostics; computer simulation; PENELOPE.

Introdução

A radiação com energia suficiente para remover elétrons de átomos inicialmente neutros em sua interação com a matéria é dita ionizante. O uso crescente de radiações ionizantes com finalidades médicas nas últimas décadas tem proporcionado rápido diagnóstico, cura ou melhora significativa da qualidade de vida de pacientes com diferentes características clínicas. As principais áreas de sua aplicação têm sido a medicina nuclear, a radioterapia e o radiodiagnóstico.

Na medicina nuclear são usados materiais radioativos com fins diagnósticos e terapêuticos, onde através de imagens formadas por cintilografia é possível estudar a morfologia e a fisiologia dos órgãos de interesse. A radioterapia consiste na utilização de radiações para destruir células tumorais através da danificação de seu material genético, impedindo seu crescimento e reprodução. Já no radiodiagnóstico o objetivo é a avaliação médica de tecidos e funções orgânicas do corpo humano, normais e anormais, por meio de imagens produzidas pela atenuação de raios-x.

Um dos maiores problemas envolvendo radiações ionizantes é que estas podem induzir efeitos biológicos nocivos nos órgãos e tecidos pela deposição de energia e produção de íons, podendo danificar moléculas como o DNA e gerar diversos efeitos indesejáveis. Altas doses de radiação (maiores que 0,5 Gy) produzem efeitos considerados determinísticos, que geralmente resultam em morte celular, que é definida como a perda de sua capacidade reprodutiva. Dentre estes efeitos estão a manifestação de eritema, epilação, indução de catarata e esterilidade. Efeitos estocásticos ou probabilísticos podem ser induzidos por doses menores de radiação, sendo que os mais graves são mutações genéticas e carcinogênese.

Esta característica danosa das radiações ionizantes determina que todo procedimento envolvendo sua aplicação seja obrigatoriamente acompanhado de princípios de radioproteção. O objetivo da proteção radiológica é prevenir a ocorrência de efeitos determinísticos e minimizar, através do controle da dose absorvida, os efeitos estocásticos produzidos pela radiação ionizante (Huda e Slone, 1995).

Órgãos governamentais responsáveis por normatizar e fiscalizar os serviços de física médica como o Conselho Nacional de Energia Nuclear e a Agência Nacional de Vigilância Sanitária têm estabelecido, de acordo com normas internacionais, as

diretrizes a ser seguidas na área de radioproteção. Cabe então à comunidade científica desenvolver métodos que viabilizem o desenvolvimento e a implementação de sistemas que satisfaçam as necessidades de proteção radiológica exigidas pela legislação e ao mesmo tempo não limitem os benefícios do uso das radiações ionizantes.

Em nosso trabalho o objeto de estudo foi o radiodiagnóstico. Nossa intenção foi sistematizar uma ferramenta computacional que simule acuradamente o processo físico envolvendo a produção de raios-x e permita o desenvolvimento de procedimentos de proteção radiológica. Através do conhecimento do espectro de energias dos raios-x produzidos por uma ampola de uso médico é possível conhecer e controlar a dose depositada no paciente. Outra possibilidade de estudo é o da exposição dos profissionais da área médica envolvidos nos procedimentos diagnósticos. Neste caso a dose de radiação geralmente absorvida pelo paciente não é tão preocupante quanto a absorvida pelos médicos, enfermeiros ou técnicos responsáveis, pois a frequência de exposição a que estes últimos estão sujeitos é muito maior.

Como as características da interação de fótons com a matéria dependem da energia dos mesmos, o conhecimento do espectro de emissão de raios-x é uma importante ferramenta no estudo da física médica. Como exemplo temos a dose depositada no paciente e profissionais envolvidos em serviços de radiodiagnóstico. A camada semi-redutora é uma grandeza importante para o cálculo da blindagem no dimensionamento de dispositivos de proteção radiológica. A qualidade das imagens geradas em radiografias e tomografias computadorizadas também é determinada pelo espectro de energia do feixe incidente, que influencia diretamente no contraste obtido.

O modo mais direto de se conhecer o espectro de raios-x produzido em uma ampola é medi-lo diretamente com a utilização de detectores de radiação. Este processo depende da disponibilidade de equipamentos nem sempre acessíveis aos laboratórios. Foram desenvolvidos então métodos de se estimar o espectro de energias gerado por meio de simulação computacional de seu processo de produção. O primeiro trabalho neste sentido foi a teoria desenvolvida por Kramers (1923), que após ser modificada por outros autores deu origem aos modelos semi-empíricos de Birch e Marshall (1978) e Tucker *et al.*, (1991). Birch e Marshall desenvolvem um modelo teórico para o espectro contínuo e utiliza uma relação empírica para as linhas características sugerida por Green e Cosslett (1968). Seus cálculos levam em conta a filtragem inerente, adicionada através

do ajuste dos dados experimentais de McMaster *et al.*, (1969). Tucker, Barnes e Chacraborty (1990) desenvolveram o método TBC partindo da teoria de Birch e Marshall e ajustando-a aos dados experimentais de Fewell *et al.*, (1981), onde conseguem resultados mais satisfatórios que os de seus precedentes.

Modelos empíricos foram impulsionados pelos trabalhos experimentais de Epp e Weiss (1966) e Fewell e Shuping (1977). No primeiro espectros são obtidos por técnicas de cintilação e no segundo são utilizados detectores de germânio. O método de Boone e Seibert (1997) consiste na interpolação polinomial dos dados de Fewell *et al.*, (1981) ligeiramente modificados para que os resultados fossem aplicados a suas próprias medidas.

O método computacional que utilizamos para simulação do espectro de raios-x foi o de Monte Carlo (Kulkarni e Supe, 1984; Acosta *et al.*, 1998; Bhat *et al.*, 1998; Verhaegen *et al.*, 1999; Ng *et al.*, 2000, Verhaegen e Castellano, 2002; Ben Omrane *et al.*, 2003; Ay *et al.*, 2004, 2005; Salvat *et al.*, 2003). Este tipo de simulação oferece uma alternativa a algumas dificuldades inerentes aos outros métodos, como limitações na geometria considerada e no número de materiais estudados, pois estes parâmetros nos outros métodos devem sempre reproduzir os do arranjo experimental empregado. No que se refere ao procedimento computacional, no entanto, a simulação de Monte Carlo exige mais tempo e recursos que os métodos empíricos ou semi-empíricos.

Devido à modelagem física mais acurada e dados de seção de choque de interação apropriados, o método Monte Carlo tem sido o melhor meio de predição do espectro de raios-x, mesmo em geometrias complexas (Zaidi e Sgouros, 2002). Através dele é possível simular o transporte de elétrons e fótons no interior do alvo e dos filtros, obtendo assim informações detalhadas sobre os fatores que contribuem para a formação do espectro (Acosta *et al.*, 1998). Alguns autores desenvolveram códigos próprios de simulação (Kulkarni e Supe, 1984; O'Meara *et al.*, 1998) enquanto outros têm utilizado códigos de simulação Monte Carlo de aplicabilidade geral e de domínio público como EGS4 (Bhat *et al.*, 1998, 1999), Ben Omrane *et al.*, 2003), MCNP4C (Verhaegen *et al.*, 1999, Mercier *et al.*, 2000), ITS (Ng *et al.*, 2000) e PENELOPE (Baró *et al.*, 1995, Salvat *et al.*, 2003).

No presente trabalho, o método Monte Carlo usado para simular os espectros de raios-x foi implementado através do código PENELOPE, um acronismo para

“PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons”. Este código simula o transporte de elétrons e fótons em materiais arbitrários, que podem ser elementos com número atômico $Z \leq 92$ ou compostos químicos, e sua aplicabilidade ampla permite simulações na faixa de energias de 1 keV a 1 GeV. O código PENELOPE foi desenvolvido por F. Salvat, J. M. Fernandez-Varea e J. Sempau na Facultat de Física (ECM), Universitat de Barcelona, Espanha, e é distribuído pela Nuclear Energy Agency Databank, um órgão pertencente à Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD), sediada em Paris, França (Salvat *et al.*, 2003). Sua utilização tem sido grande em simulações envolvendo altas energias, sobretudo aquelas envolvendo procedimentos de radioterapia (Ben Omrane *et al.*, 2003, Verhaegen *et al.*, 1999), mas pouco encontramos na literatura referente à sua utilização em situações envolvendo baixas energias, na faixa comumente empregada em diagnósticos médicos (Ye *et al.*, 2004, Lhove *et al.*, 2002), fato que veio a motivar o presente trabalho.

Abordamos no capítulo 1 os aspectos teóricos envolvidos no trabalho, como as características do espectro de raios-x e sua importância, os tipos de interações de elétrons e fótons com a matéria, os aspectos gerais de simulação de Monte Carlo, o algoritmo misto de simulação para elétrons utilizado no PENELOPE e o método usado por ele ao considerar a emissão de fótons de raios-x. No capítulo 2 descrevemos os aspectos operacionais do código PENELOPE e as características físicas envolvidas no processo de produção de raios-x, como as da ampola geradora e filtros. São discutidas então as geometrias e demais aspectos físicos relevantes nas simulações. Terminamos o capítulo discutindo como o código PENELOPE foi empregado em nosso problema. Analisamos nos resultados e discussões a confiabilidade do método empregado na descrição do sistema considerado. Avaliamos a qualidade dos valores obtidos e os comparamos com outros disponíveis na literatura. Concluimos então com uma crítica do procedimento utilizado e de sua eficiência em levar a cabo os objetivos assumidos, propondo sugestões para a utilização e a continuidade deste trabalho.

1 Fundamentos teóricos

1.1 Interações de elétrons e fótons com a matéria

1.1.1 Interações eletrônicas

As interações de elétrons energéticos no interior de sólidos podem ser classificadas como espalhamento elástico, espalhamento inelástico, emissão por frenamento (*bremsstrahlung*) ou aniquilação de pósitrons. Suas características básicas são discutidas nesta seção. A figura 1.1 mostra-os esquematicamente.

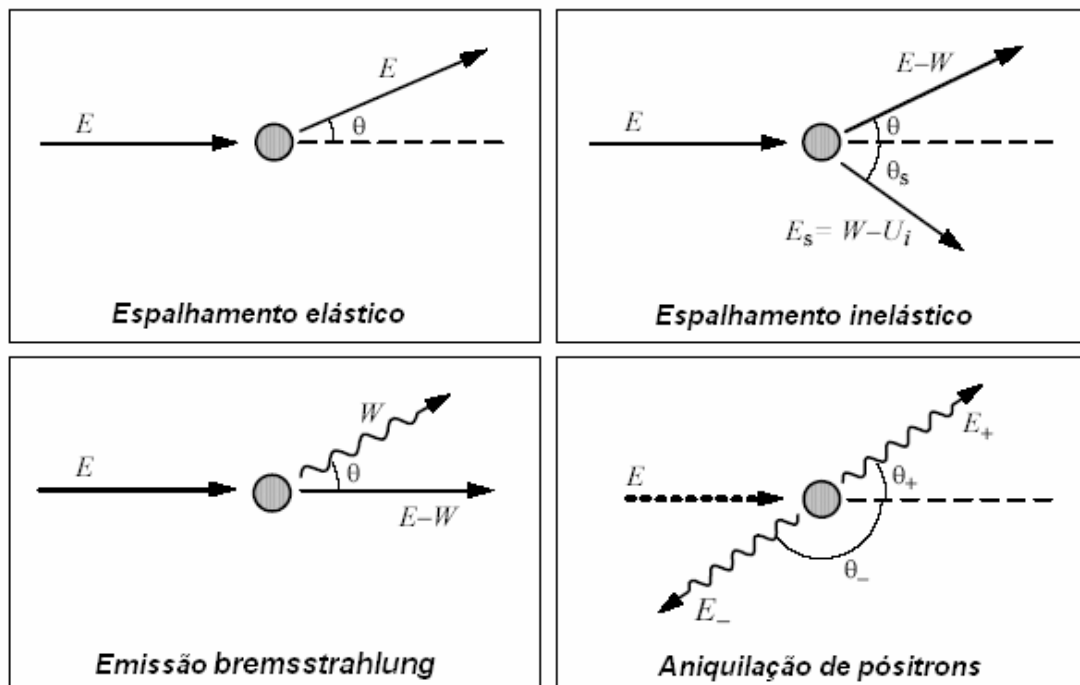


Figura 1.1: Interações básicas de elétrons e pósitrons com a matéria (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

Espalhamento elástico

Espalhamento elástico ocorre quando a energia interna do sistema (partícula, átomo ou molécula) permanece inalterado no curso da interação. O projétil muda sua direção de movimento mas sua energia cinética permanece inalterada. De fato, há sempre uma pequena perda de energia menor que 1eV devida ao recuo do alvo, como requer a conservação do momento, mas seu efeito de parada é desprezível para elétrons com energias da ordem de alguns kiloeletronvolt.

Espalhamento inelástico

Colisões inelásticas envolvem excitações eletrônicas no alvo. Uma fração da energia cinética do projétil é absorvida pelo alvo, que sofre uma transição para um estado excitado. A quantidade de energia transferida pode variar de alguns eV até toda a energia cinética do projétil. Excitações de fônons são produzidas por pequenas perdas de energia cinética dos elétrons. Estas também geram elétrons e fótons secundários de baixa energia. Transferências maiores resultam na geração de elétrons secundários rápidos e ionização de camadas internas, com subsequente emissão de raios-x característicos e elétrons Auger. Os mecanismos de interação inelástica são descritos a seguir:

a) Excitação de fônon

Cerca de 99% da energia depositada no sólido pelo feixe eletrônico é transferida em eventos com pequenas perdas de energia (< 1 eV). Isto gera excitações de fônons, que são oscilações da rede cristalina que levam ao aquecimento do alvo.

b) Excitação de elétrons secundários

Espalhamento inelástico de elétron incidente pode acarretar na promoção de elétrons fracamente ligados da banda de valência à banda de condução em semicondutores e isolantes ou mesmo ejetar elétrons da banda de condução em metais. Os elétrons ejetados ou secundários têm energia suficiente para movimentar-se através do sólido, tipicamente entre 0 e 50 keV, ficando assim também sujeitos a colisões inelásticas e perda de energia.

c) Ionização de camadas internas

Um elétron energético pode ionizar elétrons fortemente ligados, produzindo assim vacâncias em camadas internas. O preenchimento destas vacâncias ocorre através de um conjunto limitado de transições permitidas de elétrons em camadas mais externas. Este processo ocorre obedecendo a regras de seleção bem definidas (Eisberg e Resnick, 1979), mostradas esquematicamente na figura 1.2. A transição de um elétron

de uma camada para uma vacância em outra mais interna pode resultar na emissão de um fóton. Este processo de relaxamento radioativo origina raios-x característicos, cujas energias identificam o elemento emissor e o par de camadas eletrônicas envolvidas.

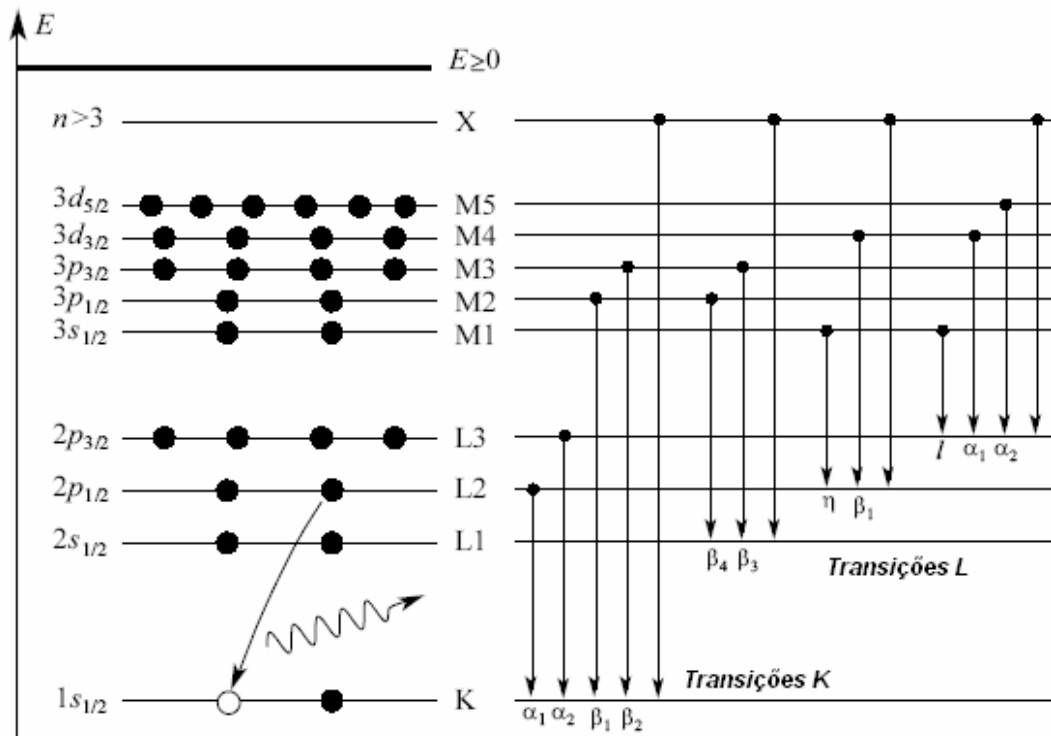


Figura 1.2: Notação para elétrons de camadas atômicas internas (esquerda) e transições radioativas possíveis a estas camadas (direita) (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

d) Elétrons Auger

Vacâncias em camadas atômicas internas podem relaxar-se através da emissão de raios-x ou de elétrons Auger. Esta ocorre quando a energia de transição é diretamente transferida para um elétron em uma camada externa. A emissão de fótons característicos e de elétrons Auger ocorrem com diferentes probabilidades. A produção de raios-x

característicos é dada pelo rendimento fluorescente ω e aumenta com o número atômico do átomo ionizado, enquanto elétrons Auger são emitidos principalmente na relaxamento de elementos leves excitados (Johns e Cunningham, 1983).

e) Catodoluminescência

Quando certos materiais semicondutores sofrem excitações de baixa energia, relaxam-se pela emissão de fótons de grande comprimento de onda, nas faixas do ultravioleta, luz visível e infravermelho do espectro eletromagnético. Este fenômeno é chamado luminescência, e o prefixo adicionado identifica o tipo de excitação sofrida. Temos a roentgenluminescência quando a excitação é por raios-x, fotoluminescência quando luz é incidida e catodoluminescência quando a excitação ocorre por impacto eletrônico.

Emissão *bremsstrahlung*

Elétrons rápidos penetrando meios material sofrem contínuas acelerações causadas pelo potencial eletrostático local dos átomos. Este potencial é devido à distribuição espacial de carga atômica. Como resultado, os elétrons desacelerados podem emitir fótons enquanto diminuem sua energia cinética. Esta radiação é conhecida pelo termo alemão *Bremmstrahlung* que significa radiação de frenamento. Como o

elétron incidente pode perder qualquer porção de sua energia cinética em um único evento radiante, a energia dos fótons produzidos por Bremsstrahlung pode variar de zero até a energia máxima do feixe eletrônico incidente.

Aniquilamento de pósitrons

Quando pósitrons penetram um meio material com uma determinada energia cinética, pode aniquilar-se ao encontrar um elétron deste meio pela emissão de dois fótons. Como as energias empregadas em nosso trabalho são bem menores que as requeridas para que haja produção de pares de elétrons e pósitrons (1.02 MeV), esta aniquilação não é considerada em nossas simulações.

1.1.2 Interações Fotônicas

As interações entre os fótons produzidos e os átomos dos materiais alvo podem ser espalhamento coerente, incoerente, absorção fotoelétrica e produção de pares, mostradas esquematicamente na figura 1.3. Assim como fizemos na seção anterior para interações envolvendo elétrons incidentes, descrevemos aqui os aspectos principais das colisões de fótons incidindo em átomos.

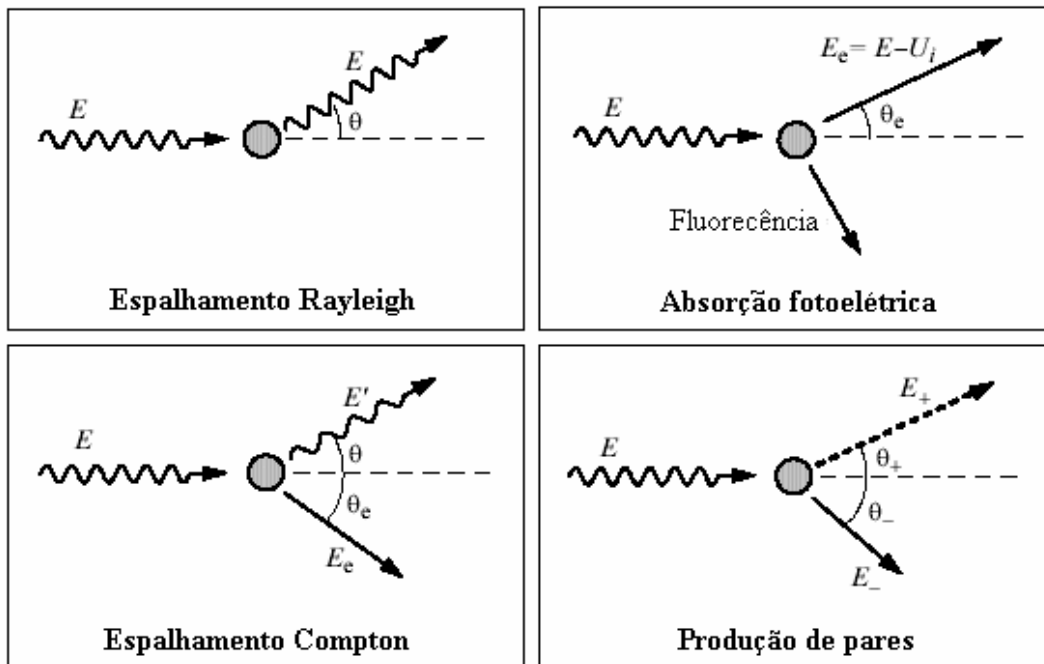


Figura 1.3: Interações de fótons com a matéria (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

Espalhamento Rayleigh ou coerente

No espalhamento Rayleigh fótons são espalhados sem que haja excitação do átomo alvo, ou seja, as energias dos fótons incidentes e espalhados são a mesma. O espalhamento é denominado coerente devido à superposição coerente das ondas eletromagnéticas difratadas pelas diferentes partes da distribuição de carga atômica (Campos, 2003).

Espalhamento Compton ou incoerente

No espalhamento Compton um fóton é absorvido por um elétron atômico, que emite um fóton secundário. Esta radiação tem comprimento de onda maior e direção de propagação diferente daquela do fóton original. O elétron ativo é promovido a um estado livre, produzindo uma vacância no átomo original.

Absorção Fotoelétrica

Ocorre quando toda a energia do fóton incidente é transferida ao átomo alvo, que passa a um estado excitado. A energia do fóton é absorvida por um elétron atômico, que é ejetado com uma energia cinética E_k igual à energia do fóton E_f menos a energia E_i de ligação do elétron à camada atômica de origem. Evidentemente o processo só pode ocorrer quando $E_f > E_i$. A seção de choque fotoelétrica apresenta linhas de absorção características correspondendo às energias de ionização das diferentes camadas eletrônicas. Entre cada par de linhas de absorção sucessivas a seção de choque varia continuamente com E_f , como mostra a figura 1.4.

Absorção fotoelétrica ocorre preferencialmente nas camadas mais internas do átomo, produzindo vacâncias que o tornam altamente excitado. O átomo então relaxa-se como no caso de ionização por impacto eletrônico, emitindo raios-x característicos ou elétrons Auger. A emissão de raios-x após absorção fotoelétrica (e também após espalhamento Compton por elétrons de camadas internas) é conhecida como fluorescência de raios-x.

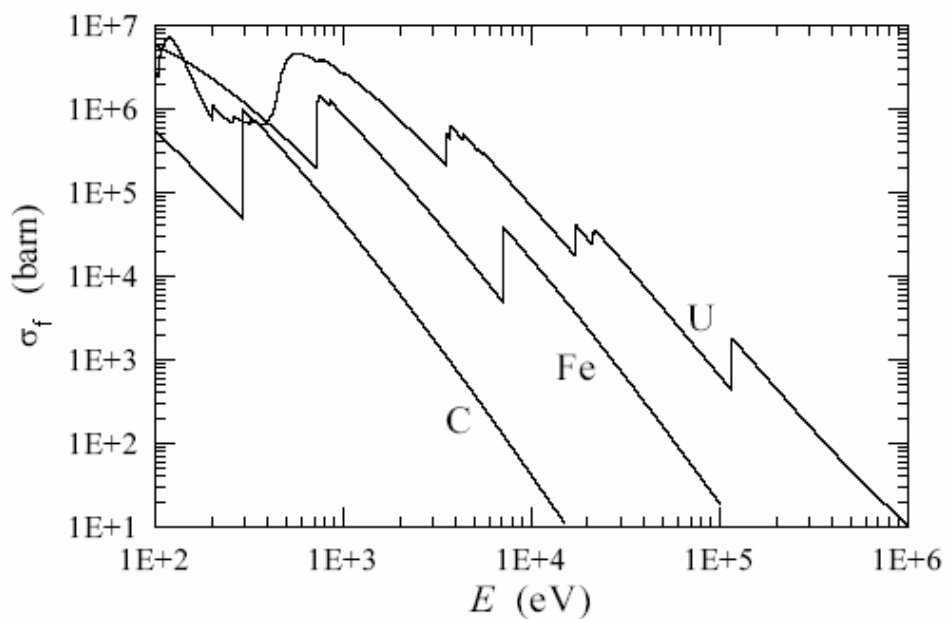


Figura 1.4: Seções de choque fotoelétrica para o carbono, ferro e urânio como função da energia do fóton incidente (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

Produção de pares

Pares de elétrons e pósitrons podem ser criados pela absorção de um fóton na vizinhança de um núcleo ou um elétron, que absorvem energia e momento de modo a conservar estas quantidades. A energia mínima para que possa ocorrer produção de pares na vizinhança de um núcleo, considerado de massa infinita, é $2m_e c^2$, onde m_e é a massa do elétron e c é a velocidade da luz no vácuo.

1.1 Simulação Monte Carlo

O nome Monte Carlo (MC) é usado para designar uma classe de métodos numéricos baseados no uso de números aleatórios. No presente trabalho, o método MC é usado para descrever o transporte acoplado de elétrons e fótons dentro de materiais. Como mencionado anteriormente, nosso procedimento de simulação é baseado no código PENELOPE. As rotinas do programa PENELOPE simulam trajetórias de partículas no interior de uma grande variedade de materiais¹. A geometria pode ser definida diretamente no programa principal ou com auxílio do pacote geométrico PENGEOM (Salvat *et al.*, 2003).

A trajetória de uma partícula no material é descrita como uma sequência aleatória de pequenos deslocamentos seguidos por uma interação, onde o projétil muda sua direção de movimento, perde energia e ocasionalmente produz partículas secundárias. Desta forma a simulação de um evento experimental, como um feixe eletrônico incidindo em um sólido consiste na geração numérica de histórias aleatórias dos elétrons incidentes e no registro das quantidades físicas de interesse, enquanto a simulação de cada elétron progride. Para simular as histórias precisamos de um modelo de interação, que é definido pela seção de choque de interação (CS) correspondente ao processo físico envolvido. A CS mede a probabilidade de que o evento aconteça, e pode ser interpretada como a área efetiva de um átomo com a qual partículas incidentes interagem.

¹ O arquivo PDCOMPOS.TAB apresenta 279 materiais pré-definidos, mas são também possíveis novas combinações destes.

1.2.1 Variáveis estocásticas

O primeiro componente do cálculo Monte Carlo é a geração numérica de variáveis estocásticas, quantidades que resultam de um processo reprodutível mas seu valor real não pode ser predito com. Na computação, variáveis estocásticas são geradas através de transformações de números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo (0,1) obtidos através de algum método gerador de seqüências pseudo-aleatórias (Rubinstein, 1981).

Seja x uma variável aleatória contínua no intervalo $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$. Para medir a probabilidade de obtermos x no intervalo (a,b) usamos a probabilidade $P\{x|a < x < b\}$, definida como a razão n/N do número n de valores de x que pertencem ao intervalo considerado em relação ao número N de valores gerados de x , no limite $N \rightarrow \infty$. A probabilidade de obtermos x em um intervalo diferencial de comprimento dx entre x_1 e $x_1 + dx$ pode ser expressa como

$$P\{x|x_1 < x < x_1 + dx\} = p(x)dx, \quad (1.1)$$

onde $p(x)$ é a função distribuição de probabilidade (PDF) de x , que deve ser positiva e normalizada, ou seja, deve satisfazer as relações

$$p(x) \geq 0 \quad \text{e} \quad \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p(x) dx = 1. \quad (1.2)$$

Dada uma variável estocástica contínua x , a função de distribuição cumulativa de x é definida por

$$P(x) \equiv \int_{x_{\min}}^x p(x') dx', \quad (1.3)$$

que é função não-decrescente de x e varia de $P(x_{\min}) = 0$ a $P(x_{\max}) = 1$ como mostra a figura 1.5. A função de distribuição cumulativa de $p(x)$ tem uma função inversa $P^{-1}(\xi)$. A transformação $\xi = P(x)$ define uma nova variável estocástica que assume valores no intervalo $(0,1)$, como mostra também a figura 1.5. Devido à correspondência entre os valores de x e ξ , a PDF de ξ , $p_{\xi}(\xi)$, e a de x , $p(x)$, são relacionadas por $p_{\xi}(\xi)d\xi = p(x)dx$, e

$$p_{\xi}(\xi) = p(x) \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = p(x) \left(\frac{dP(x)}{dx} \right)^{-1} = p(x)[p(x)]^{-1} = 1, \quad (1.4)$$

ou seja, ξ é distribuída uniformemente no intervalo $(0,1)$. Então, se ξ é um número aleatório, a variável x definida por $P^{-1}(\xi)$ é aleatoriamente distribuída no intervalo (x_{\min}, x_{\max}) com PDF $p(x)$, como vemos na figura 1.5. Isto fornece um método prático para a obtenção de valores aleatórios de x , usando um gerador de números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo $(0,1)$. A aleatoriedade de x é assegurada pela de ξ . A equação (1.3) pode ser escrita como

$$\xi = \int_{x_{\min}}^x p(x') dx' \quad (1.5)$$

que é denominada equação de amostragem da variável x . Este procedimento para amostragem aleatória é conhecido como método da transformada inversa. Ele é particularmente adequado para PDFs $p(x)$ dadas por expressões analíticas, de modo que a equação de amostragem (1.5) pode ser resolvida também analiticamente.

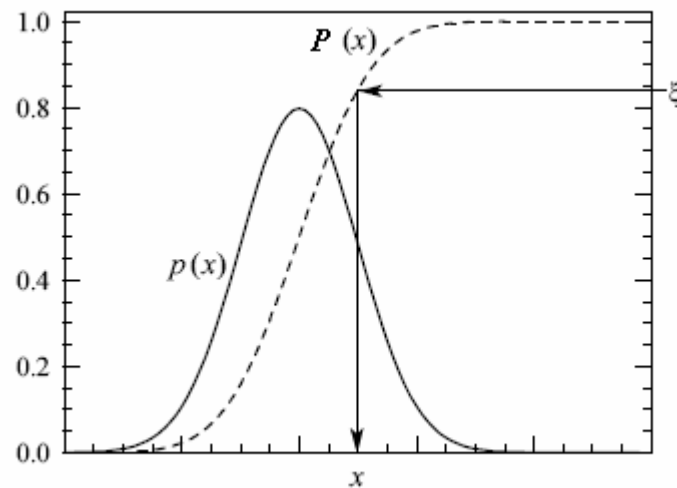


Figura 1.5: Amostragem aleatória de uma distribuição $p(x)$ usando o método da transformada inversa
(adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

1.2.2 Médias estatísticas e incerteza

Em simulação MC, a quantidade de interesse descrita genericamente por Q é estimada como o valor médio de uma grandeza q em um grande número N de histórias simuladas,

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i, \quad (1.6)$$

onde q_i é o valor de q obtido na i -ésima história. O desvio padrão pode ser expresso por (Salvat *et al.*, 2003):

$$\sigma_Q = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - Q^2 \right]}. \quad (1.7)$$

Para grandes valores de N , σ_Q mede a incerteza estatística do resultado da simulação MC. A probabilidade de que o valor exato encontre-se no intervalo $Q \pm \sigma_Q$ é de 68% , no intervalo $Q \pm 2\sigma_Q$ é de 95,4% e no $Q \pm 3\sigma_Q$ é de 99.7%.

1.2.3 Redução Variacional

Em situações práticas pode ocorrer que a quantidade de interesse Q tenha uma grande incerteza estatística σ_Q . Isto pode ocorrer se apenas uma fração dos caminhos simulados contribuírem para a contagem. A estratégia mais simples para reduzir a incerteza estatística é aumentar N , mas isto pode demandar demasiado tempo computacional. Através da redução variacional podemos, para um dado tempo

computacional, reduzir a incerteza estatística. Um apanhado do método de redução variacional é feito por Salvat *et al.*, 2003.

A simulação de raios-x por incidência de elétrons com energia na faixa de kilovolts em sólidos é um exemplo de simulação que demanda bastante tempo e é afetada por incertezas estatísticas relativamente grandes. Isto deriva do fato de as interações que originam raios-x, ionização de camadas intermas e emissão *bremsstrahlung*, ocorrem com probabilidades extremamente pequenas. No código PENELOPE, a eficiência da simulação do espectro de raios-x é melhorada com o uso do método de redução variacional chamado de interação forçada, também conhecido como método dos pesos. Esta técnica consiste em aumentar artificialmente a seção de choque total por um fator Π , diminuindo o livre caminho médio do processo de interesse. Esta alteração equivale a aumentar a probabilidade de interação por unidade de caminho da partícula incidente. Para não alterar com isso os parâmetros da simulação, é assumido um peso estatístico inverso $1/\Pi$ às variáveis de estado da partícula ao final das simulações. Este método não altera o espectro simulado e efetivamente diminui a incerteza estatística dos resultados (Salvat *et al.*, 2003).

1.2.4 Geração de caminhos aleatórios

Consideremos uma partícula com energia E_0 movendo-se em um dado sólido, onde os átomos ou moléculas estão aleatoriamente distribuídos com densidade uniforme. Por simplicidade, consideremos que a partícula pode interagir com o meio através de dois mecanismos de espalhamento: interação inelástica (A) e elástica(B). A

cada interação a partícula pode perder energia W e/ou mudar sua direção de movimento. A deflexão angular é determinada pelo ângulo azimutal ϕ e o ângulo polar de espalhamento θ , dados pela direção de movimento da partícula antes e após o espalhamento. O modelo de interação é completamente especificado pelas seções de choque diferenciais (DCS) atômicas ou moleculares (dependendo do material do alvo) para cada interação considerada. DCS são grandezas que apresentam uma dependência específica em relação às variáveis relevantes em cada tipo de interação. Quando integradas nestas variáveis as DCS fornecem as seções de choque totais para cada interação. Em nosso exemplo as DCS são dadas por

$$\frac{d^2\sigma_A}{dWd\Omega}(E_0;W,\theta) \quad \text{e} \quad \frac{d\sigma_B}{d\Omega}(E_0;\theta), \quad (1.8)$$

onde $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido na direção (θ, ϕ) . Como a distribuição angular das partículas espalhadas é axialmente simétrica em relação à direção de incidência, as DCS são independentes do ângulo azimutal ϕ . Consideremos o número de moléculas por unidade de volume:

$$N = N_A \frac{\rho}{A_W}, \quad (1.9)$$

onde N_A é o número de Avogadro, ρ é a densidade de massa do material e A_w é a massa molecular. A probabilidade por unidade de caminho de que a partícula sofra uma interação do tipo A é dada pelo inverso do livre caminho médio

$$\frac{1}{\lambda_A} = N \int_0^{E_0} dW \int_{4\pi} d\Omega \frac{d^2\sigma_A}{dWd\Omega}(E_0, W, \theta) = N \sigma_A(E_0), \quad (1.10)$$

onde $\sigma_A(E_0)$ é a seção de choque total para interações do tipo A. A perda de energia W e o ângulo de espalhamento θ , que descrevem o efeito de cada evento de interação, são variáveis estocásticas. Suas PDF são obtidas simplesmente normalizando suas correspondentes DCS,

$$p_A(E_0, W, \theta) = \frac{1}{\sigma_A(E_0)} \frac{d^2\sigma_A}{dWd\Omega}(E_0, W, \theta) \quad (1.11)$$

e

$$p_B(E_0, \theta) = \frac{1}{\sigma_B(E_0)} \frac{d\sigma_B}{d\Omega}(E_0, \theta). \quad (1.12)$$

Considerando os eventos A e B correlacionados, a probabilidade de interação de qualquer tipo por unidade de caminho é

$$\frac{1}{\lambda_T} = \frac{1}{\lambda_A} + \frac{1}{\lambda_B} = N[\sigma_A(E_0) + \sigma_B(E_0)] = N\sigma_T(E_0), \quad (1.13)$$

onde λ_T é o livre caminho médio total entre colisões e $\sigma_T(E_0)$ é a seção de choque total.

O comprimento s do caminho livre percorrido pela partícula entre interações consecutivas é também uma variável estocástica que obedece uma distribuição exponencial,

$$p(s) = \frac{1}{\lambda_T} \exp(-s/\lambda_T). \quad (1.14)$$

Valores aleatórios de s podem ser facilmente gerados pelo método da transformada inversa discutido na seção 1.2.1. A equação (1.5) fornece então para s a fórmula de amostragem

$$s = -\lambda_T \ln(1-\xi) = -\lambda_T \ln \xi, \quad (1.15)$$

onde a última igualdade verifica-se por ser $(1-\xi)$ também um número aleatório distribuído no intervalo $[0,1]$.

No código PENELOPE a simulação do caminho da partícula acontece em três dimensões. O sólido é considerado homogêneo com densidade ρ e átomos aleatoriamente distribuídos. Desta forma, após cada espalhamento, o estado da partícula é definido por sua posição $r = (x, y, z)$, energia E e cossenos direcionais do movimento, ou seja, os componentes do vetor $\hat{d} = (u, v, w)$ vistos do referencial no laboratório. Cada caminho simulado é descrito como uma seqüência de estados r_n, E_n, \hat{d}_n onde r_n é a posição do n -ésimo espalhamento, E_n a energia e \hat{d}_n a direção do movimento imediatamente após cada evento de interação. A geração de um caminho randômico da partícula transportada, que começa como uma seqüência de estados (r_n, E_n, \hat{d}_n) , acontece da seguinte forma:

- (i) o valor aleatório do deslocamento livre s até a próxima interação é gerado pela fórmula de amostragem (equação 1.15);
- (ii) a partícula avança a distância s na direção do descolamento \hat{d} . A próxima interação ocorre na posição $r_{n+1} = r_n + s\hat{d}_n$;
- (iii) o tipo de interação (A ou B) é aleatoriamente selecionado das probabilidades dos diferentes eventos de interação

$$P_{A(ouB)} = \frac{\sigma_{A(ouB)}}{\sigma_T}; \quad (1.16)$$

- (iv) os valores dos ângulos θ , ϕ e da perda de energia W são obtidos das correspondentes DCS;
- (v) a energia reduzida da partícula é $E_{n+1} = E_n - W$;
- (vi) a direção de movimento $\hat{d}_{n+1} = (u', v', w')$ logo após a interação é obtida por uma rotação do vetor unitário $\hat{d}_n = (u, v, w)$.

Estes passos são repetido quantas vezes forem necessárias até que a convergência seja atingida. Um caminho é terminado quando a partícula deixa a amostra ou quando sua energia torna-se menor que uma dada energia de absorção E_{abs} . Partículas com uma energia menor que este valor têm sua simulação interrompida e sua energia é considerada absorvida pelo meio.

Radiação suficientemente energética pode gerar partículas secundárias com energias menores. Isto pode ocorrer através dos eventos de impacto direto (colisões inelásticas, emissão *bremsstrahlung*, espalhamento Compton, absorção fotoelétrica) ou através do relaxamento de átomos ionizados ou excitados. O código PENELOPE simula a emissão de raios-x característicos e elétrons Auger que resultam do relaxamento de vacâncias produzidas nas camadas K e L por absorção fotoelétrica, espalhamento de fótons ou impacto de elétrons e pósitrons. Partículas secundárias emitidas com energia inicial maior que a energia de absorção correspondente são guardadas na memória e simuladas após concluída a simulação do caminho primário.

1.3 Simulação mista ou de classe II para elétrons

As seções de choque diferenciais (DCS) adotadas pelo código PENELOPE são definidas como funções analíticas ou obtidas em tabelas numéricas, sendo acuradas para a maioria das situações práticas. Elas são simples o bastante para permitirem métodos rápidos de sorteio, importante no método Monte Carlo, e ao mesmo tempo suficientemente flexíveis para levar em conta os aspectos relevantes das interações.

O conhecimento das DCS de interação permite-nos realizar a simulação detalhada ou exata do transporte de elétrons e pósitrons na matéria. Este tipo de simulação é viável em duas situações: quando a simulação ocorre em amostras finas de material ou os projéteis têm energias relativamente baixas, até algumas centenas de eV. À altas energias, no entanto, o número de interações sofridas por um elétron em sua desaceleração é muito grande, o que torna inviável a simulação detalhada de seu transporte. São então utilizados métodos de simulação condensados ou de classe I, como os empregados nos códigos de simulação ETRAN (Berger e Seltzer, 1988), ITS3 (Halbleib *et al.*, 1992), EGS4 (Nelson *et al.*, 1985) e GEANT3 (Brun *et al.*, 1986). Nestes códigos uma teoria de espalhamento múltiplo é utilizada para descrever o efeito global de muitas colisões em um simples passo computacional. O PENELOPE difere dos outros códigos de aplicabilidade semelhante por utilizar um método misto (Salvat *et al.*, 2003) ou de classe II para a simulação do transporte de elétrons e pósitrons. Este considera as simulações detalhadamente para interações fortes e de forma condensada no caso de interações leves, superando assim muitas das limitações dos métodos de classe I.

Interações individuais envolvendo valores do ângulo de espalhamento θ ou da perda de energia W maiores que os valores de corte θ_c e W_c previamente determinados são consideradas fortes, e sua simulação é feita detalhadamente. As que apresentam ângulo de espalhamento ou perda de energia menores que os valores de corte são chamadas leves e são simuladas condensadamente. Ao longo do percurso entre interações fortes consecutivas ou entre uma interação forte e uma interface², um elétron pode sofrer muitas interações leves. Como a evolução do elétron é pouco influenciada por estas interações, o efeito cumulativo dos muitos eventos leves que ocorrem ao longo de um certo percurso pode ser simulado acuradamente através de uma abordagem de espalhamento múltiplo. No código PENELOPE os valores de corte são determinados dinamicamente, ou seja, eles variam com a energia cinética do elétron transportado de forma que a simulação é mais condensada a altas energias e torna-se progressivamente mais detalhada à medida que a energia cinética dos elétrons diminui.

² Superfície que separa dois meios de composições diferentes.

1.3.1 Espalhamento elástico de elétrons e modelo MW

Interações elásticas são por definição aquelas onde os estados quânticos inicial e final do átomo ou molécula alvo são os mesmos. Uma interação elástica pode ser descrita em termos dos ângulos de espalhamento polar θ e azimutal ϕ do projétil. As DCS adotadas no código PENELOPE (Salvat *et al.*, 2003) são dadas por uma função analítica simples obtida pelo modelo de Wentzel modificado (MW). A utilização de seções de choque analíticas oferece a vantagem de simplificar o algoritmo de amostragem e minimizar a base de dados numéricos necessários. Os resultados obtidos pelo modelo MW são confiáveis apenas em condições de múltiplo espalhamento, quando cada elétron sofre em média 20 colisões elásticas ou mais em seu caminho completo.

Colisões elásticas são espalhamentos dos projéteis pelo campo eletrostático do átomo. Para potenciais centrais de espalhamento, a distribuição angular de elétrons de spin não polarizado é axialmente simétrica em relação à direção de incidência, o que significa que não há dependência em ϕ . Para efeito de simulação, é conveniente medir a deflexão angular produzida por cada interação em termos da variável

$$\mu = \frac{(1 - \cos \theta)}{2}. \quad (1.17)$$

A DCS elástica do átomo pode ser escrita como na equação 1.12:

$$\frac{d\sigma_{el}(E)}{d\mu} = \sigma_{el}(E)p_{el}(E, \mu), \quad (1.18)$$

onde $p_{el}(E, \mu)$ é a PDF de μ em cada colisão e $\sigma_{el}(E)$ é a seção de choque elástica total,

$$\sigma_{el}(E) = \int \frac{d\sigma_{el}(E)}{d\Omega} d\Omega = \int \frac{d\sigma_{el}(E)}{d\mu} d\mu, \quad (1.19)$$

onde $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido na direção (θ, ϕ) . O livre caminho médio elástico entre eventos sucessivos é

$$\lambda_{el} = \frac{1}{N\sigma_{el}(E)}, \quad (1.20)$$

onde N é o número de átomos por unidade de volume.

Os valores médios de μ e μ^2 em cada colisão elástica são dados por

$$\langle \mu \rangle = \int_0^1 \mu p_{el}(E, \mu) d\mu \quad \text{e} \quad \langle \mu^2 \rangle = \int_0^1 (\mu - \mu^2) p_{el}(E, \mu) d\mu. \quad (1.21)$$

A primeira seção de choque de transporte $\sigma_{el,1}$ é definida como

$$\sigma_{el,1} = \int (1 - \cos \theta) \frac{d\sigma_{el}(E)}{d\Omega} d\Omega = 2\sigma_{el}(E) \int_0^1 \mu p_{el}(E, \mu) d\mu = 2\sigma_{el} \langle \mu \rangle, \quad (1.22)$$

e o primeiro livre caminho médio de transporte $\lambda_{el,1}$ é dado por

$$\lambda_{el,1}^{-1} = N\sigma_{el,1} = \frac{2}{\lambda_{el}} \langle \mu \rangle, \quad (1.23)$$

que fornece uma medida da deflecção angular média por unidade de caminho. Por analogia com o potencial de parada, que é definido como a perda média de energia por unidade de caminho, a quantidade $2\lambda_{el,1}^{-1}$ é denominada potencial de espalhamento.

A DCS do modelo MW (Salvat *et al.*, 2003) é dada por uma função analítica fechada baseada nas DCS de Wentzel que são DCS para espalhamento de elétrons por um campo blindado de Coulomb calculado pela primeira aproximação de Born (Campos, 2003). A distribuição angular $p_{el}(E, \mu)$ do MW contém dois parâmetros, que são determinados pela reprodução dos valores esperados $\langle \mu \rangle$ e $\langle \mu^2 \rangle$. Desta forma, as DCS do MW são completamente determinadas pela seção de choque elástica total $\sigma_{el}(E)$ e por estes valores esperados.

A base de dados elásticos no código PENELOPE contém estas quantidades para elétrons e pósitrons com energias entre 100 eV e 1 GeV. Esta base de dados foi gerada com o uso do código de ondas parciais DPWA (Campos, 2003), que resolve a equação de Dirac para o movimento de projéteis no campo do átomo alvo usando análise de ondas parciais. O cálculo é baseado na aproximação de campo estático (Mott and Massey, 1965; Walker, 1971), onde as interações entre a partícula incidente e o átomo são descritas por um potencial local central,

$$V(r) = V_{ex}(r) + z_0 e V_{st}(r), \quad (1.24)$$

onde r é a posição do projétil e z_0 sua carga em unidades de e (-1 para elétrons e +1 para pósitrons). O termo $V_{ex}(r)$ é aplicado apenas para elétrons e representa a aproximação local para a interação de troca entre o projétil e os elétrons atômicos (Salvat, 1998). $V_{st}(r)$ é a energia de interação eletrostática entre o projétil e o átomo, considerado na origem do sistema de referência,

$$V_{st}(r) = \frac{Ze}{r} - e 4 \pi \left[\frac{1}{r} \int_0^r \rho(r') r'^2 dr' + \int_0^\infty \rho(r') r' dr' \right] \quad (1.25)$$

onde $\rho(r)$ é a densidade eletrônica do átomo, assumida como esfericamente simétrica. Esta densidade foi calculada usando o código de multiconfiguração Dirac-Fock de Desclaux (1975) para átomos livres. A DCS por unidade de ângulo sólido para espalhamento elástico de um projétil com energia cinética E_0 incidindo no elemento de ângulo sólido $d\Omega$ na direção (θ, ϕ) é dada por (Walker, 1971):

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = |g(\theta)|^2, \quad (1.26)$$

onde $f(\theta)$ e $g(\theta)$ são respectivamente as amplitudes de espalhamento direta e de troca de spin, respectivamente, determinadas pelo código DPWA (Salvat *et al.*, 2003).

A figura 1.6 mostra as DCS calculadas por ondas parciais para espalhamento elástico de elétrons por átomos de ouro como função da deflecção $\mu = (1 - \cos\theta)/2$. Estes resultados numéricos ilustram a variação das DCS elásticas com a energia cinética do projétil e o número atômico Z do alvo, e que as DCS do ouro e outros elementos pesados apresentam uma estrutura complexa para elétrons de baixa energia.

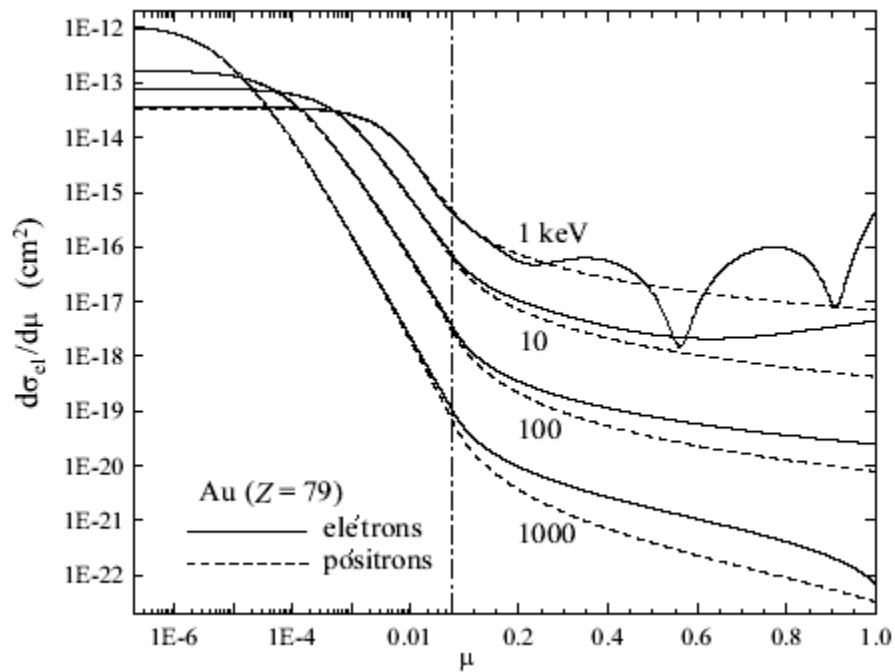


Figura 1.6: DCS para espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos de ouro como função da deflecção $\mu = (1 - \cos \theta)/2$ (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

Na figura 1.7 são comparadas DCS por ondas parciais numéricas com o modelo analítico MW para as DCS do espalhamento de elétrons por átomos de ouro. Ela mostra que o modelo MW reproduz de forma um tanto rudimentar os aspectos das DCS do método de ondas parciais. Esta diferença não é importante, no entanto, pois ambas as DCS levam aos mesmos valores de σ_{el} , $\langle \mu \rangle$ e $\langle \mu^2 \rangle$. Isto garante que os modelos proporcionam resultados equivalentes nas simulações, desde que o número de eventos considerados para cada elétron seja maior que 10, pois o método de espalhamento múltiplo suprime os detalhes dos eventos individuais (Salvat *et al.*, 2003).

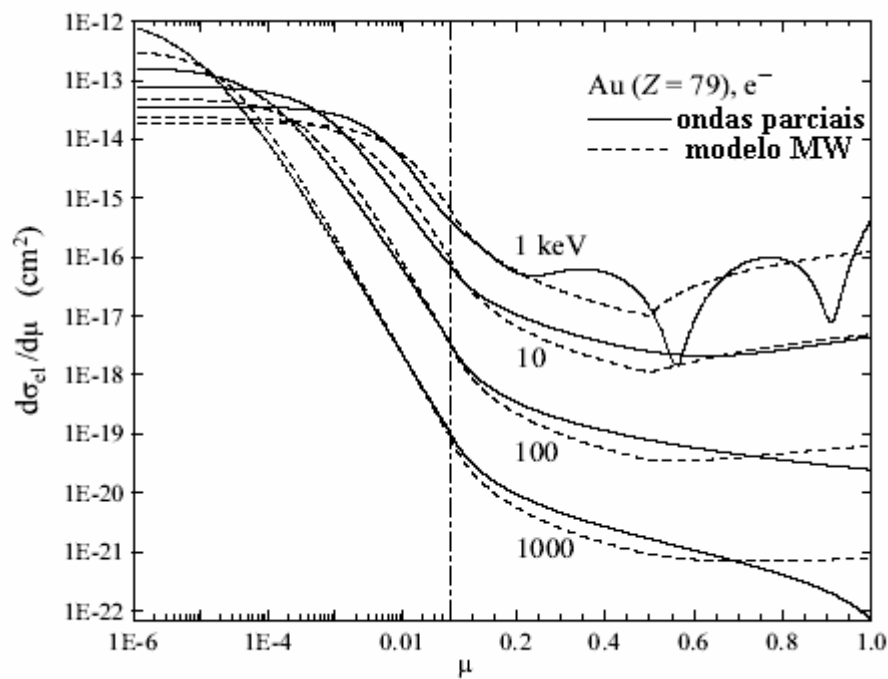


Figura 1.7: Método de ondas parciais e modelo MW para espalhamento elástico de elétrons por átomos de ouro (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

1.3.2 Espalhamento inelástico de elétrons e modelo GOS

Colisões inelásticas são descritas por DCS que são funções da energia e do ângulo de espalhamento. No código PENELOPE estas DCS são calculadas por meio da primeira aproximação relativística de Born (Campos, 2003). Isto é feito através do modelo de força do oscilador generalizado (GOS) proposto por Liljequist (1983). Neste modelo, as excitações de cada camada eletrônica no átomo são representadas por um oscilador harmônico simples, caracterizados por sua força de oscilação e energia de ressonância. O modelo GOS permite a determinação analítica do livre caminho médio e do poder de parada inelásticos. Ele descreve aproximadamente a dependência observada destas quantidades com a energia cinética do projétil. A distribuição de perda de energia em cada evento de interação leve difere, no caso deste modelo, de distribuições obtidas por outros métodos considerados mais realistas. Esta diferença no entanto não afeta o resultado global, desde que cada elétron sofra em média um número estatisticamente suficiente de colisões elásticas dentro do material (Campos, 2003). A emissão de elétrons secundários no caso de espalhamento de elétrons é também simulado de acordo com o modelo de oscilador de Liljequist e os poderes de freiamento calculados desta forma estão de acordo com aqueles recomendados por ICRU Report 37 (1984).

1.4 Simulação do espectro de emissão de raios-x

O código PENELOPE proporciona uma descrição bastante acurada da transmissão de elétron na matéria. Os caminhos gerados para os elétrons podem ser

considerados réplicas numéricas dos caminhos reais, como é requerido para garantir acurácia no cálculo da distribuição de fótons emitidos (Campos, 2003). Nesta seção consideramos os mecanismos de interação eletrônica que geram fótons e suas interações com o meio até chegar ao detector. O código simula as histórias dos fótons através do método convencional de simulação detalhada. As interações consideradas são espalhamento coerente (Rayleigh), espalhamento incoerente (Compton) e absorção fotoelétrica. A produção de pares ocorre para energias maiores que 1.22 MeV,. Como estes valores da energia são bem maiores que os usados em raios-x diagnósticos a produção de pares não é considerada em nosso trabalho. As seções de choque implementadas são dadas por funções analíticas de três modos distintos:

- (i) obtidas de cálculos por primeiros princípios, como no espalhamento Compton ou nas DCS angulares para fotoelétrons;
- (ii) definidas em bases de dados numéricas, como na absorção fotoelétrica ou produção de pares;
- (iii) calculadas por métodos semi-empíricos, com parâmetros obtidos no ajuste de dados de interações confiáveis (Campos, 2003).

Um modelo consistente para a simulação de emissão de raios-x deve levar em consideração os seguintes aspectos do processo:

- (i) a distribuição espacial das ionizações de camadas internas e eventos de *bremstrahlung* ao longo do caminho do projétil;

- (ii) as probabilidades de ionização das várias camadas eletrônicas dos átomos por impacto do feixe de elétrons;
- (iii) as energias e probabilidades de emissão dos raios-x e elétrons Auger liberados no relaxamento em cascata dos átomos ionizados.

1.4.1 Ionização de camadas internas por impacto eletrônico

As colisões inelásticas com elétrons de camadas internas (K ou L) são descritas pelo modelo GOS proposto por Liljequist (1983). As seções de choque para ionização de camadas internas obtidas com o modelo GOS diferem marcadamente de resultados obtidos por métodos mais acurados de e também de medidas experimentais. No entanto, na simulação da trajetória da partícula este não é um sério inconveniente, pois a seção de choque para ionização de camadas internas é muito menor que a seção de choque inelástica total. O modelo GOS fornece assim uma descrição apropriada do efeito médio das colisões elásticas no percurso do projétil. Em contrapartida, na simulação da produção de raios-x faz-se necessária uma descrição mais acurada da ionização de camadas internas, onde ocorrem expressivas perdas de energia e a posterior emissão de fótons característicos (K_{α} e K_{β}).

A estratégia adotada na versão 2003 do código PENELOPE foi simular a criação de vacâncias em camadas internas por impacto de elétrons como um processo independente. Para evitar dupla contagem, é considerado que a energia e a direção do projétil permanecem inalterados no evento de ionização de camada interna. Assim toda a informação necessária para simular a produção de raios-x pela ionização de uma dada

camada reduz-se a uma tabela. Esta apresenta valores de seção de choque de ionização desta camada como função da energia cinética do projétil, $\sigma_{camada}(E_0)$. Com esta estratégia podemos facilmente alterar a seção de choque de ionização sem mudar a estrutura do código.

Os valores de seção de choque de ionização para as camadas K e L incluídas na versão 2003 do código PENELOPE foram obtidos por primeira aproximação relativística de ondas planas de Born, usando GOS parciais, a partir da seção de choque fotoelétrica das camadas (Salvat *et al.*, 2003). Este modelo é equivalente ao método semiclássico dos quanta virtual (Mayol e Salvat, 1990).

1.4.2 Emissão *bremsstrahlung*

Fótons gerados por *bremsstrahlung* são emitidos sob um espectro contínuo de energia que vai de zero até o valor correspondente à energia cinética máxima dos projéteis. Sua simulação no código PENELOPE é feita pelo algoritmo desenvolvido por Acosta *et al.* (2002). Este é baseado em DCS numéricas para elétrons incidentes em um meio de baixa densidade, amorfo e composto de um único elemento com número atômico Z . A DCS depende da energia dos fótons emitidos W e do ângulo polar θ deste em relação à direção do projétil, e pode ser expressa como

$$\frac{d^2\sigma}{dWd(\cos\theta)} = \frac{d\sigma}{dW} p(Z, E, \kappa; \cos\theta), \quad (1.27)$$

onde $\kappa \equiv W/E$ é a energia reduzida do fóton e $d\sigma/dW$ é a DCS de perda de energia, diferencial apenas em relação à energia do fóton emitido. Finalmente $p(Z, E, \kappa; \cos\theta)$ é a PDF de $\cos\theta$ para os valores dados de E_0 e κ .

A DCS de *bremsstrahlung* ponderada é definida como

$$\sigma_p = \left(\frac{\beta^2}{Z^2} \right) W \frac{d\sigma}{dW}, \quad (1.28)$$

onde $\beta = v/c$ é a velocidade do elétron em unidades de velocidade da luz. Seltzer e Berger (1985) produziram extensas tabelas com valores destas DCS. São considerados elementos com número atômico variando de 1 a 92 e elétrons com energias de 1 keV a 10 GeV.

Embora versões anteriores do código PENELOPE utilizem outros modelos, a versão atual adota para *bremsstrahlung* o modelo descrito por Acosta *et al.* (2002):

- (i) a energia dos fótons emitidos é avaliada do espectro numérico de perda de energia dos elétrons obtido das tabelas de seções de choque ponderadas de Seltzer e Berger (1985). A DCS é tabelada muitos valores da energia cinética dos elétrons, permitindo rápida e acurada interpolação linear na variável $\ln E_0$;
- (ii) a distribuição angular dos fótons emitidos $p(Z, E, \kappa; \cos\theta)$ é representada por uma expressão analítica (distribuição de dipolo modificada, no referencial em repouso em relação à partícula emissora) com parâmetros determinados pelo ajuste de funções de ondas parciais de Kissel *et al.* (1983).

Este modelo de simulação praticamente reproduz as seções de choque diferenciais calculadas por Kissel *et al.* (1983), que são os cálculos mais confiáveis hoje disponíveis, indicando que ele faz uma correta correlação entre as variáveis W e θ (Campos, 2003).

1.4.3 Relaxamento de átomos excitados

Vacâncias em camadas eletrônicas internas do átomo podem ser produzidas por absorção fotoelétrica, espalhamento Compton e impacto eletrônico. O código PENELOPE assume que o processo de relaxamento atômico é independente do processo pelo qual a vacância inicial foi criada. O relaxamento atômico é considerado até o completo preenchimento das camadas K e L , ou seja, até que as vacâncias migrem para a camada M ou outras mais externas. Estas vacâncias externas produzem muitos raios-x e elétrons Auger, e contribuem apenas para a região de baixa energia do espectro. A cascata de relaxamento é uma seqüência de dois tipos de eventos:

- (i) transições radiativas ($S_0 \rightarrow S_1$): Ocorrem quando um elétron da camada S_1 preenche uma vacância na camada S_0 , a diferença de energia é liberada na forma de uma onda eletromagnética e uma nova vacância ocorre na camada S_1 .
- (ii) transições não-radiativas ($S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2$): Um elétron da camada S_1 preenche uma vacância na S_0 e a energia liberada é absorvida por um elétron Auger da camada S_2 . Neste processo são produzidas duas vacâncias, uma na camada S_1 e outra na S_2 . Transições não radiativas do tipo $LI - LJ - Xq$, , que envolvem uma

transição eletrônica entre duas subcamadas L (indicadas genericamente por LI e LJ) e a liberação de um elétron de uma camada externa (indicada por Xq) são conhecidas como transições Coster-Kronig de camada L (Campos, 2003).

As informações necessárias para simular a cascata de relaxamento para cada elemento constituem uma tabela com valores de:

- (i) transições possíveis e probabilidades de transição;
- (ii) energias de elétrons e raios-x emitidos;
- (iii) energias que geram vacâncias nas camadas K e subcamadas L .

As probabilidades de transição são extraídas de LLNL Evaluated Atomic Data Library (Perkins *et al.*, 1991). As energias dos raios-x característicos emitidos em transições $S_0 \rightarrow S_1$ são expressas por

$$E_x = U_{S_0} - U_{S_1} \quad (1.29)$$

onde U_{S_i} é a energia de ionização de um elétron na camada S_i do átomo neutro, que é obtida da base de dados do código PENELOPE. A energia cinética do elétron Auger emitido na transição não radioativa $S_0 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2$ é expressa como

$$E_e = U_{S_0} - U_{S_1} - U_{S_2}. \quad (1.30)$$

Estas energias de emissão são consideradas de tal modo que a presença das vacâncias não alteram as energias de ionização das camadas eletrônicas ativas, o que é

uma aproximação. Esta abordagem não produz linhas de emissão satélites L_α e L_β , que são originadas no preenchimento de uma camada L duplamente ionizada após uma transição de Coster-Kronig. Esta emissão libera uma energia ligeiramente diferente daquela emitida quando a camada contém uma vacância simples. As probabilidades de transição são aproximadas, como dito anteriormente, sendo que para a camada K é esperada uma acurácia de cerca de 99%. Para outras camadas a incerteza é bem maior. Em uma vacância na camada L por exemplo a soma das probabilidades de transição radiativas tem uma incerteza próxima a 20% (Perkins *et al.*, 1991).

A simulação da cascata de relaxamento é feita pela sub-rotina RELAX. A transição que preenche a vacância inicial é selecionada aleatoriamente de acordo com as probabilidades de transição adotadas. Esta transição deixa o íon com uma ou duas vacâncias. Se a energia do raio-x característico ou elétron Auger emitido for maior que a correspondente energia de absorção, as variáveis de estado da partícula secundária produzida é armazenada em um arquivo para posterior simulação. A cascata continua pela repetição do processo para cada vacância remanescente. A simulação termina ou quando as camadas K e L estiverem preenchidas ou quando não houver energia suficiente para produzir radiação ativa, ou seja, com energia maior que a energia de absorção.

Os valores de energia dos raios-x dados pela equação (1.29) são aproximados e produzem linhas características deslocadas dos valores medidos. A versão 2003 do PENELOPE resolve este problema incorporando à base de dados de relaxamento valores experimentais de raios-x das camadas K e L tabeladas por Bearden (1967). Notemos que as intensidades das linhas simuladas dependem das seções de choque de ionização e probabilidades de transição de relaxamento, as quais estão sujeitas a

incertezas consideráveis. Diferenças em relação a intensidades medidas devem ser por este motivo esperadas (Campos, 2003).

1.4.4 Atenuação de raios-x pela matéria

Um feixe de raios-x de energia E_f e intensidade I_0 incidindo normalmente num bloco de espessura t é atenuado à medida que penetra no material. A intensidade $I(t)$ de raios-x não espalhados a uma profundidade t é dada por:

$$I(t) = I_0 \exp\left[-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)\rho t\right], \quad (1.31)$$

onde ρ é a densidade de massa do material e μ/ρ é seu coeficiente de atenuação por massa para fótons de energia E_f .

Para um material com um único elemento, o coeficiente de atenuação por massa é relacionado à seção de choque atômica de absorção σ_a através de

$$\mu = \frac{N_A \rho}{A} \sigma_a, \quad (1.32)$$

onde N_A é o número de Avogadro e A é a massa atômica. A seção de choque atômica σ_a é a soma das seções de choque para interações do tipo Rayleigh, Compton e absorção fotoelétrica.

1.5 Características do espectro de raios-x

A distribuição espectral de fótons emitidos por um tubo de raios-x diagnóstico é mostrada na figura 1.8. O gráfico mostra a o número de fótons de raios-x simulados por intervalo de energia como função da energia dos fótons. A área sob a curva é igual ao número total de fótons simulados. Um outro modo de representar o espectro é mostrado na figura 1.9 e consiste em graficar a energia incidente por intervalo de energia em função da energia dos fótons. Isto é feito multiplicando-se cada ordenada do gráfico anterior pela correspondente abcissa, ou seja, o número de fótons pela energia que carregam. A área sob esta curva é igual à energia total carregada pelo feixe.

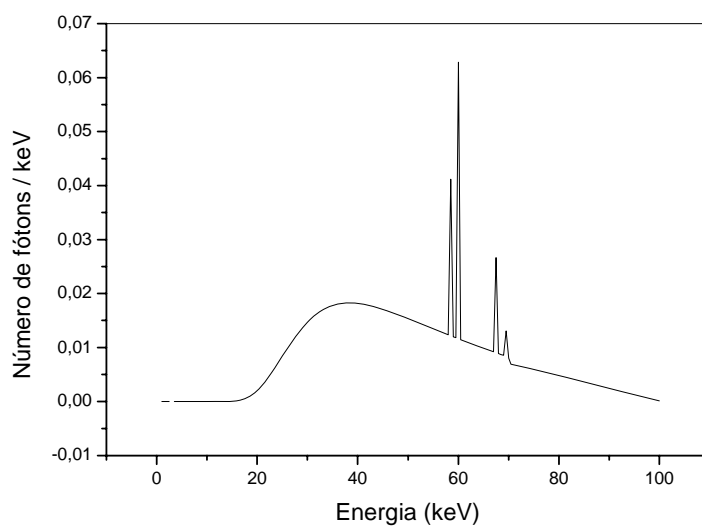


Figura 1.8: Distribuição espectral do número de fótons simulados.

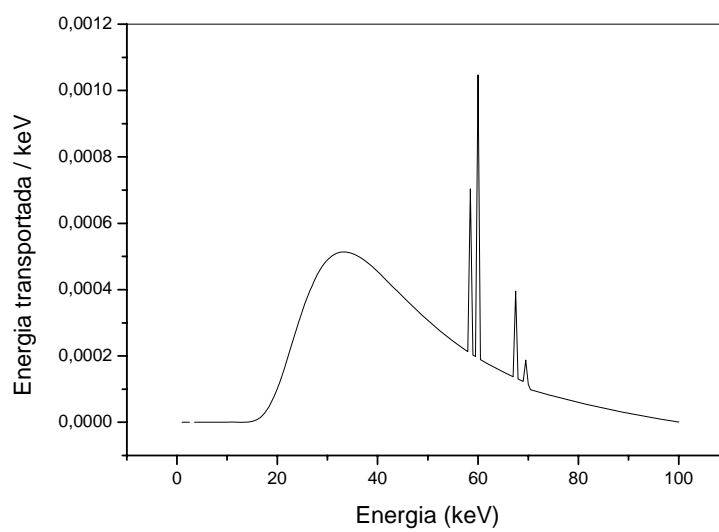


Figura 1.9: Distribuição espectral da energia transportada pelos fótons simulados.

O espectro é formado por uma superposição de dois processos de produção de raios-x. Uma componente contínua é originada por radiação de *bremsstrahlung*, chamada de “radiação branca” em analogia com o espectro contínuo da luz branca emitida por uma lâmpada de filamento aquecido. Os picos discretos são devidos à chamada radiação característica e suas energias dependem do número atômico do material que os produz. Como em nosso trabalho faremos comparações entre espectros gerados por diferentes métodos, faz-se necessário que os normalizemos. Isto é feito igualando os valores de suas áreas a um mesmo valor constante.

1.6 Efeito anódico

Quando o feixe eletrônico incide no ânodo, fótons podem ser gerados em várias regiões do mesmo e propagar-se por qualquer direção. Deste modo, dependendo da profundidade da origem do fóton e de sua direção de propagação, ele pode ser mais ou menos atenuado dentro do próprio alvo. Isto faz com que a intensidade de fótons produzida não seja superficialmente homogênea na região de interesse, inclusive variando quando são usados ânodos com diferentes ângulos de inclinação.

2 Materiais e métodos

2.1 Estrutura do pacote de distribuição do código PENELOPE

O pacote de distribuição do código PENELOPE apresenta a estrutura esquematizada na figura 2.13 e seu conteúdo é assim distribuído:

(i) Subdiretório FSOURCE com os arquivos:

MANUAL.TXT : Manual abreviado com informações gerais.

PENELOPE.F : Pacote de sub-rotinas de simulação.

PENGEOM.F : Pacote de sub-rotinas para geometrias.

PENVARED.F : Pacote de sub-rotinas de redução variacional.

MATERIAL.F : Código do usuário para gerar arquivos de dados de materiais.

TABLES.F : Programa do usuário para tabelar dados de interação de partículas em um dado material.

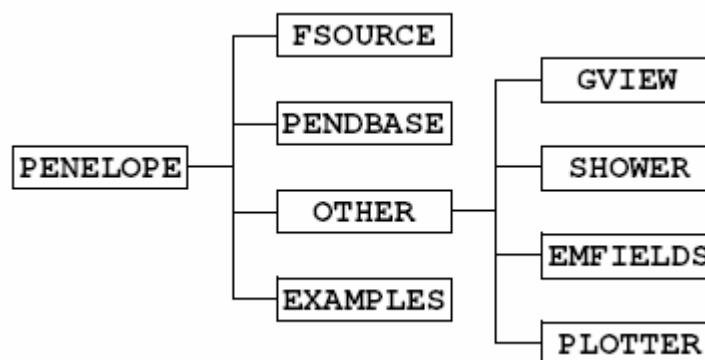


Figura 2.13: Estrutura de arquivos do código PENELOPE.

(ii) Subdiretório EXAMPLES com os arquivos:

PENSLAB.F : Código do usuário para transporte de partículas em um bloco.

PENSLAB.IN : Exemplo de arquivo de entrada do PENSLAB.

AL.MAT : Arquivo de dados do material para o PENSLAB.

PENCYL.F : Código do usuário para geometrias formadas por camadas cilíndricas incididas por feixes axialmente simétricos.

PENCYL.IN : Exemplo de arquivo de entrada de dados para o PENCYL.

PENDOSSES.F : Código do usuário para geometrias quadráticas arbitrárias.

PENDOSSES.IN : Exemplo de arquivo de entrada de dados para o PENDOSSES.

PENDOSSES.GEO : Arquivo de definição da geometria para o PENDOSSES.

NAIAL.MAT : Arquivo de dados do material para o PENCYL e PENDOSSES.

TIMER.F : Sub-rotina genérica de tempo. Mostra o tempo de execução em segundos para os compiladores g77 e Compaq Visual Fortran 6.5.

NOTIMER.F : Sub-rotina de tempo para ser usada com outros compiladores.

Para obtermos o arquivo executável do código MATERIAL precisamos compilar e anexar os arquivos MATERIAL.F e PENELOPE.F. Este arquivo executável deve ser rodado no mesmo subdiretório dos arquivos de base de dados PENDBASE. Os arquivos executáveis dos códigos PENSLAB, PENCYL e PENDOSSES são obtidos compilando e anexando os seguintes conjuntos de códigos fonte:

PENSLAB : PENSLAB.F, PENELOPE.F e TIMER.F.

PENCYL : PENCYL.F, PENELOPE.F, PENVARED.F e TIMER.F.

PENDOSES : PENDOSES.F, PENELOPE.F, PENGEOM.F e TIMER.F.

Os programas são escritos em linguagem FORTRAN 77 e deste modo devem rodar em qualquer computador. A única exceção é o programa TIMER.F, que deve ser adaptada ao compilador disponível.

(iii) Subdiretório PENDBASE : Base de dados de materiais do PENELOPE. Contém 465 arquivos com a extensão .TAB e nomes começando com as letras PD.

(iv) Subdiretório OTHER. Contém os subdiretórios:

- GVIEW : Contém os visualizadores geométricos GVIEW2D, GVIEW3D e GVIEWC, que rodam no sistema operacional Microsoft Windows. Traz também vários exemplos de arquivos de definição de geometrias.
- EMFIELDS : Contém o pacote de sob-rotinas PENFIELD.F. Este simula o transporte de elétrons e pósitrons sob influência de campos eletrostáticos e magnetostáticos externos.
- SHOWER : Contém o arquivo SHOWER.EXE que opera apenas no sistema Microsoft Windows. Este código gera trajetórias de elétrons e fótons dentro de um bloco e os mostra na tela. Para usar o SHOWER basta copiá-lo no diretório PENDBASE e executa-lo. Esta ferramenta

é útil para fins didáticos por ilustrar o transporte de radiação na matéria.

- PLOTTER : Os programas PENSLAB E PENCYL geram vários arquivos de saída com funções densidade de probabilidade simuladas. Cada arquivo destes tem um cabeçalho descrevendo seu conteúdo que está em um formato pronto para ser visualizado com um programa gráfico. O programa utilizado pelo PENELOPE é o GNUPLOT, escolhido por ser pequeno, disponível para várias plataformas e gratuito (sites de distribuição são listados no site <http://www.gnuplot.info>). O diretório PLOTTER contém *scripts* que graficam as funções simuladas. Para visualizar os resultados do PENSLAB por exemplo, basta copiar o arquivo PENSLAB.GNU do diretório PLOTTER para o que contém os resultados e entrar com o comando “GNUPLOT PENSLAB.GNU” (ou clicar no ícone).

2.2 Estrutura e funcionamento do código PENELOPE

Nesta seção descrevemos a estrutura do código PENELOPE e como ele funciona. A parte principal da simulação é feita pelo pacote de sub-rotinas PENELOPE, que realiza simulação de feixes de elétrons e fótons que são considerados réplicas dos reais em meios de várias composições. Histórias de fótons são simuladas detalhadamente, enquanto os caminhos de elétrons e pósitrons são simulados através do procedimento misto explicado na seção 1.3. Partículas secundárias emitidas com energia inicial maior que a energia de corte para absorção são armazenadas e simuladas após o

término da simulação do caminho da partícula inicial. Partículas secundárias são produzidas em interações diretas (colisões inelásticas, emissão *bremsstrahlung*, aniquilação de pósitrons, espalhamento Compton, absorção fotoelétrica e produção de pares) ou como radiação fluorescente (raios-x característicos e elétrons Auger). O código PENELOPE simula radiação fluorescente que resulta de vacâncias produzidas nas camadas *K* e subcamadas *L* por absorção fotoelétrica, espalhamento Compton de fótons e por impacto de elétrons ou pósitrons. O relaxamento destas vacâncias é acompanhada até que as camadas *K* e *L* sejam totalmente preenchidas.

Como o código PENELOPE é um pacote de sub-rotinas, para que ele seja utilizado é necessário que o usuário edite um programa principal (MAIN) que coordene a simulação para cada finalidade específica. Este programa deve controlar a evolução das histórias simuladas pelo código PENELOPE e armazenar as quantidades de interesse. Cabe ao código PENELOPE efetuar a maior parte do trabalho de simulação. Ele permite ao usuário escrever seu próprio programa de simulação com geometria e grandezas de interesse arbitrários sem prévio conhecimento das intrincadas teorias de espalhamento e transporte empregadas. No caso de sistemas com geometrias arbitrárias, inclusive quadráticas, estas podem ser definidas através do programa PENGEOM. O pacote de distribuição inclui vários exemplos de programas MAIN para geometrias simples (blocos e cilindros) e um para geometrias quadráticas. Embora estes exemplos tenham a intenção de ilustrar o uso das rotinas de simulação, eles permitem o estudo de vários casos de interesse.

A figura 2.1 mostra a estrutura de arquivos necessária para uma simulação usando o código PENELOPE. Os arquivos em letras maiúsculas fazem parte do pacote PENELOPE e os que estão em itálico devem ser editados ou criados pelo usuário. Em

negrito aparece o arquivo de saída gerado na simulação. A parte (i) da figura mostra os arquivos necessários para a construção do arquivo executável que inicia e controla a simulação. Para tanto, o arquivo *main.exe* necessita das informações de entrada contidas nos arquivos *entrada.in*, *geometria.geo* e *material.mat* para que a simulação ocorra e seja criado o arquivo **saída.dat**, como mostra a parte (ii) da figura.

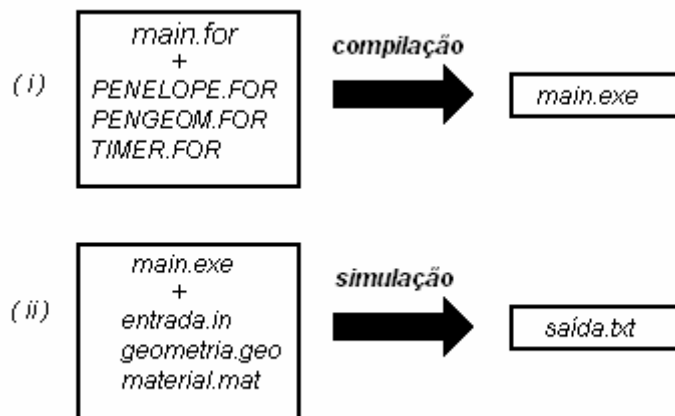


Figura 2.1: Estrutura de arquivos para simulação com o código PENELOPE. (i) Criação do arquivo executável e (ii) arquivos para a simulação.

2.2.1 Base de dados e arquivo de dados dos materiais

O PENELOPE lê as informações necessárias sobre as quantidades de interesse para cada material (propriedades físicas, seções de choque de interação, dados de relaxamento, etc...) do arquivo de dados dos materiais. Este arquivo é criado pelo Programa auxiliar MATERIAL, que extrai dados de interação atômica da base de dados.

Informações básicas sobre materiais arbitrários podem ser fornecidas pelo usuário, mas para um conjunto de 279 materiais o programa MATERIAL lê estas informações diretamente do arquivo PDCOMPOS.TAB.

Para compostos e misturas é usada uma aproximação aditiva, onde a seção de choque “molecular” é a soma das seções de choque atômicas balanceadas pelo índice estequiométrico dos elementos. Ligas e misturas são tratadas como compostos, com índices estequiométricos iguais ou proporcionais à concentração percentual de átomos de cada elemento. Para simular estruturas geométricas com vários materiais, o programa MATERIAL deve ser rodado para cada material e os arquivos de saída devem ser copiados em um único arquivo. Isto deve ser feito na ordem em que os materiais forem definidos no arquivo que representa a geometria, que será explicado adiante.

2.2.2 Estrutura do código do usuário (programa MAIN)

Como dito anteriormente o código PENELOPE deve ser complementado com um código do usuário (MAIN) que controla a evolução dos eventos simulados, armazena as quantidades de interesse e calcula valores médios ao final da simulação. A conexão do PENELOPE com o programa MAIN é feita através do *common block*:

COMMON/TRACK/E,X,Y,Z,U,V,W,WGHT,KPAR,IBODY,MAT,ILB(5) , que contém as seguintes variáveis de estado da partícula:

KPAR : Tipo de partícula (1: elétron, 2: fóton, 3: pósitron).

E : Energia da partícula (cinética para elétrons e pósitrons) (eV).

X, Y, Z : Coordenadas de posição (cm).

U, V, W : cossenos direcionais do movimento.

WGHT : Armazena o peso associado à partícula quando se usa redução variacional.

IBODY : Identifica diferentes corpos em materiais com estruturas complexas.

MAT : Material onde a partícula se move (no corpo identificado com IBODY).

ILB(5) : Vetor auxiliar com 5 índices que indicam a origem da partícula quando esta é secundária. É importante na consideração de contribuições parciais de partículas para um dado processo.

Uma partícula que se move no material M é considerada absorvida quando sua energia torna-se menor que um valor $E_{ABS}(KPAR, M)$ especificado pelo usuário. O algoritmo de transporte para elétrons e pósitrons em cada material M é controlado pelos seguintes parâmetros de simulação:

C1(M) : Deflexão angular média produzida por espalhamento elástico múltiplo ao longo de um percurso igual ao livre caminho médio entre eventos elásticos fortes consecutivos.

C2(M) : Perda fracional média de energia entre eventos elásticos fortes consecutivos.

WCC : Energia de corte para colisões inelásticas fortes (eV).

WCR(M) : Energia de corte para emissão *bremsstrahlung* fortes (eV).

Estes parâmetros determinam a acurácia e a velocidade da simulação. Para garantir acurácia C1(M) e C2(M) devem ter valores pequenos (da ordem de 0.01). Com valores maiores destas variáveis a simulação fica mais rápida e a acurácia diminui. As energias de corte WCC(M) e WCR(M) influenciam principalmente a distribuição de energia simulada. A simulação fica mais rápida com valores maiores das energias de corte, mas se estes forem muito grande a distribuição de energia é distorcida. Na prática a distribuição de energia não varia para diferentes valores de WCC(M) e WCR(M) quando estes são menores que o do incremento de energia usado na distribuição. Deste modo a resolução na distribuição de energia determina as máximas energias de corte permitidas.

O pacote de simulação é iniciado do programa MAIN com o comando:

```
CALL PEINIT(EPMAX,NMAT,IRD,IWR,INFO)
```

A sob-rotina PEINIT lê os arquivos de dados dos diferentes materiais, avalia as propriedades de espalhamento relevantes e prepara tabelas de quantidades dependentes da energia que são usadas durante a simulação. Os argumentos de entrada são:

EPMAX : Energia máxima das partículas simuladas.

NMAT : Número de diferentes materiais (menor ou igual a MAXMAT).

IRD : Unidade de entrada de dados.

IWR : Unidade de saída de dados.

INFO : Determina a quantidade de informação que é escrita na unidade de saída.

A sob-rotina PEINIT necessita também das energias de absorção EABS(KPAR,M) e dos parâmetros de simulação C1(M), C2(M), WCC(M) e WCR(M). Podemos empregar diferentes valores dos parâmetros de simulação para diferentes materiais, o que pode ser feito para aumentar a velocidade de simulação em regiões de menor interesse. Estas informações são introduzidas antes da chamada da sub-rotina PEINIT através do *common block*:

```
COMMON/CSIMPA/EABS(3,MAXMAT),C1(MAXMAT),C2(MAXMAT),W  
CC(MAXMAT),WCR(MAXMAT)
```

O código PENELOPE é estruturado de tal forma que o caminho de uma partícula é gerado como uma seqüência de segmentos de caminho (“vôos livres” ou “saltos”). No final de cada segmento a partícula sofre uma interação com o meio (um “golpe”) onde ela perde energia, muda sua direção de movimento e em certos casos produz partículas secundárias. Feixes de elétrons e fótons são simulados através de chamadas sucessivas das seguintes sub-rotinas:

CLEANS(DSMAX,DS) : Limpa o estoque secundário.

START : Inicia os parâmetros da partícula. Deve ser chamada sempre que for iniciada a simulação de um caminho (primário ou secundário) ou este encontra uma interface.

JUMP(DSMAX,DS) : Determina o comprimento do segmento de caminho até a interação seguinte.

KNOCK(DE,ICOL) : Simula um evento de interação. Calcula a nova energia, a direção do movimento após a interação e armazena o estado inicial das partículas secundárias quando geradas. Seus argumentos de saída são:

DE : perda pela partícula incidente.

ICOL : Tipo de evento que foi simulado, de acordo com a seguinte convenção:

- Elétrons (KPAR=1)

ICOL=1, primeira interação leve sorteada no início do caminho.

ICOL=2, colisão elástica forte.

ICOL=3, colisão inelástica forte.

ICOL=4, emissão Bremsstrahlung forte.

ICOL=5, ionização de camada interna por impacto eletrônico.

- Fótons (KPAR=2)

ICOL=1, espalhamento coerente (Rayleigh).

ICOL=2, espalhamento incoerente (Compton).

ICOL=3, absorção fotoelétrica.

ICOL=4, produção de pares elétron-pósitron.

- Póstrons (KPAR=3)

ICOL=1, primeira interação leve sorteada no início do caminho.

ICOL=2, colisão elástica forte.

ICOL=3, colisão inelástica forte.

ICOL=4, emissão *bremsstrahlung* forte.

ICOL=5, ionização de camada interna por impacto de póstrons.

ICOL=6, aniquilação.

SECPAR(LEFT) : Estabelece o estado inicial da partícula secundária e a remove do estoque secundário. O valor de saída LEFT é o número de partículas secundárias que permanecem no estoque no momento da chamada.

STORES(E,X,Y,Z,U,V,W,WGHT,KPAR,ILB) : Armazena a partícula no estoque secundário.

A seqüência de chamadas para gerar um caminho aleatório é independente do tipo de partícula que está sendo simulada. A simulação está esquematizada na figura 2.2 e acontece da seguinte forma:

- (i) Determina-se o estado inicial da partícula primária assumindo valores às variáveis de estado KPAR, E, posição $\hat{r} = (X, Y, Z)$ e direção de movimento $\hat{d} = (U, V, W)$. Especifica-se o corpo e o material onde a partícula se move através dos valores de IBODY e MAT, respectivamente. Pode-se também aqui definir os valores de WGHT e ILB(5).
- (ii) Chama CLEANS para zerar o estoque secundário.
- (iii) Chama START para inicializar parâmetros da partícula.
- (iv) Chama JUMP(DSMAX,DS) para determinar o comprimento DS do próximo segmento de caminho.
- (v) Calcula a posição do próximo evento:
- Se o caminho tiver atravessado uma interface, pára-se a partícula onde o caminho encontra a interface e diminui-se apropriadamente o comprimento DS.
 - Muda-se para o novo material redefinindo as variáveis IBODY e MAT.
 - Quando a partícula escapa do sistema, a simulação do caminho termina; incrementa-se o contador e vai para o passo (vii).
 - Vai para o passo (iii).
- (vi) Chama KNOCK(DE,ICOL) para simular o evento seguinte.

- Se a energia for menor que $EABS(KPAR, MAT)$, finaliza-se o caminho, incrementa-se o contador e a simulação vai para o passo (vii).
 - Volta ao passo (iv).
- (vii) Chama $SECPAR(LEFT)$ para começar a simulação do caminho de uma partícula no estoque secundário (esta partícula é automaticamente removida do estoque).
- Se $LEFT > 0$, volta ao passo (iii). O estado inicial da partícula secundária já foi determinado.
 - Se $LEFT = 0$, a simulação do feixe produzido pela partícula primária está completa. Volta ao passo (i) para gerar um novo caminho primário (ou finaliza a simulação após considerar um número suficiente de caminhos).

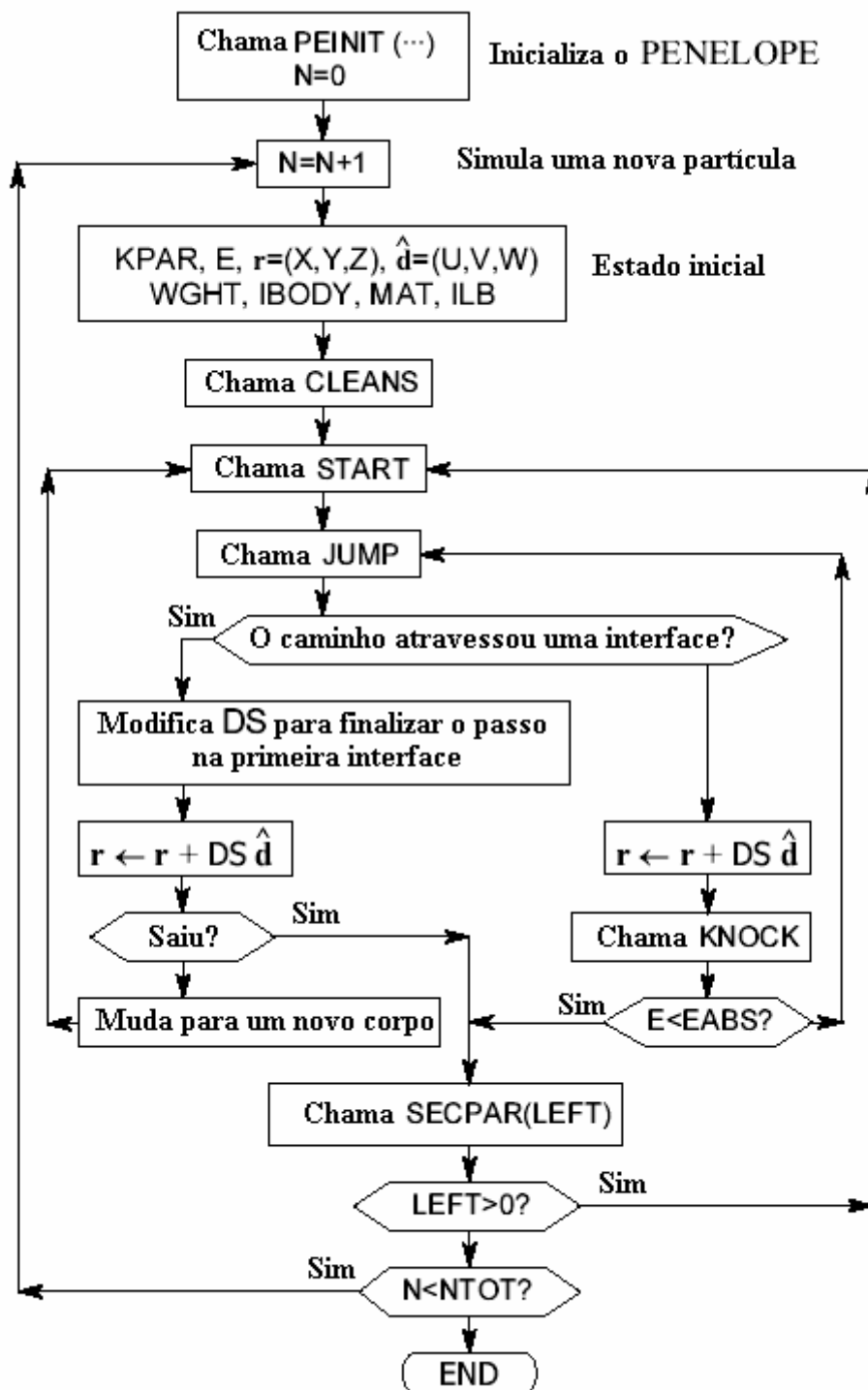


Figura 2.2: Estrutura de simulação do programa PENELOPE

Notemos que as sub-rotinas JUMP e KNOCK não alteram as coordenadas das partículas; as posições dos sucessivos eventos devem ser seguidas pelo programa MAIN

(simplesmente efetuando um deslocamento de comprimento DS na direção do movimento após cada chamada de JUMP). A energia da partícula é automaticamente reduzida pela sub-rotina KNOCK, após simular a perda de energia considerando a distribuição de probabilidade relevante. KNOCK também modifica a direção de movimento de acordo com os ângulos de espalhamento dos eventos simulados. Desta forma, na saída de KNOCK, os valores da energia E , posição $\hat{r} = (X, Y, Z)$ e direção de movimento $\hat{d} = (U, V, W)$ definem o estado da partícula após o evento de interação.

Cabe ao usuário evitar a chamada das sub-rotinas JUMP e KNOCK com energia da partícula incidente fora do intervalo $[EABS(KPAR,M), EMAX]$, o que poderia ocasionar uma interpolação incorreta das seções de choques. A simulação é abortada se a condição $EABS(KPAR,M) < E < EMAX$ não é satisfeita no início de um caminho primário ou secundário (sempre que a sub-rotina START é chamada no início do caminho).

2.2.3 Redução variacional

O conjunto de sub-rotinas PENELOPE.F procura executar simulações de forma análoga à situação real, e desta forma não inclui nenhum método de redução variacional. O arquivo fonte PENVARED.F contém sub-rotinas para efetuar os métodos de redução variacional *splitting* (VSPLIT), roleta russa (VKILL) e *interaction forcing*. Apesar de operarem como caixas pretas, estas sub-rotinas devem ser usadas com cuidado. É aconselhável que os pesos associados às partículas não sejam muito grandes nem muito pequenos. No primeiro caso uma partícula com peso grande pode encobrir as

informações coletadas de partículas com peso menor. Por outro lado, não é conveniente desperdiçar tempo simulando partículas com peso muito pequeno, com contribuições insignificantes para as grandezas de interesse.

2.3 Exemplos de programas MAIN

De modo geral, o usuário deve construir o programa MAIN que considere a geometria e as grandezas de interesse em cada caso estudado. O pacote de distribuição do código PENELOPE inclui exemplos de programas MAIN para geometrias simples (blocos e cilindros) e um para geometrias quadráticas arbitrárias que calcula um número limitado de grandezas físicas. Nestes exemplos assume-se que um único tipo de partícula é emitido da fonte de radiação. Estes programas podem ser generalizados para o caso de fontes com mais partículas incidindo com espectros de energia contínuos ou discretos.

2.3.1 Programa PENSLAB

O programa PENSLAB simula feixes de elétrons e fótons em um bloco de um dado material como mostra a figura 2.3. Ele ilustra o uso das rotinas de simulação para a geometria mais simples possível, o que o torna mais rápido que os outros programas MAIN. O bloco é limitado pelos planos $z = 0$ e $z = t$. A extensão lateral do bloco é considerada infinita. Partículas primárias começam com energia E_0 de uma fonte

puntual a uma altura z_0 no eixo z e movem-se em direções uniformemente distribuídas em um setor esférico definido por seus ângulos polares limites θ_1 e θ_2 , indicado na região hachurada da figura 2.2. Deste modo, para determinar a direção inicial, $W = \cos \theta$ é sorteado no intervalo de $\cos \theta_1$ a $\cos \theta_2$ e o ângulo azimutal ϕ é sorteado no intervalo $[0, 2\pi]$. O caso $\theta_1 = 0$ e $\theta_2 = 180^\circ$ corresponde a uma fonte isotrópica, enquanto $\theta_1 = \theta_2 = 0$ define um feixe paralelo ao eixo z .

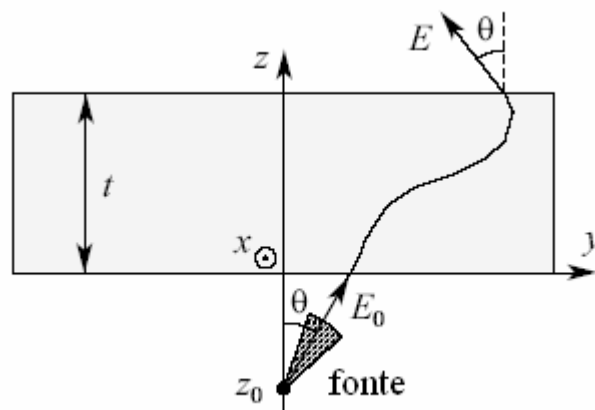


Figura 2.3: Exemplo de geometria usada no PENS LAB.

O programa PENS LAB fornece informações detalhadas sobre muitas quantidades físicas de interesse. Os arquivos de saída contém uma apresentação auto-explicativa dos resultados da simulação, que consistem de:

- (i) Frações de partículas primárias que são transmitidas, retroespalhadas e absorvidas, além do valor médio de várias quantidades (comprimento do caminho dentro da amostra; número de eventos de cada tipo por partícula; energia, direção e deslocamento lateral de partículas que deixam o material, etc...)

- (ii) Distribuição de energia de partículas primárias transmitidas e retroespalhadas.
- (iii) Distribuição angular de partículas transmitidas e retroespalhadas.
- (iv) Distribuição de dose em profundidade (energia depositada por unidade de profundidade).
- (v) Distribuição de carga depositada em profundidade.
- (vi) Distribuição de energia depositada no bloco.

Cada distribuição simulada é separadamente escrita em um arquivo como um histograma, com um cabeçalho descrevendo seu conteúdo, em um formato pronto para ser visualizado em um programa gráfico (GNUPLOT).

2.3.2 Programa PENCYL

O programa PENCYL simula o transporte de elétrons e fótons em estruturas cilíndricas. A geometria consiste em camadas de determinada espessura. Cada camada é formada por anéis concêntricos de composição, raio interno e externo determinados. O centro dos anéis em cada camada é especificado pelas coordenadas x e y . A figura 2.3 mostra uma possível geometria onde os centros dos anéis estão todos no eixo z . O arquivo fonte PENCYL.F inclui um conjunto de geometrias compostas por camadas cilíndricas que podem ser visualizadas com o programa GVIEWC.

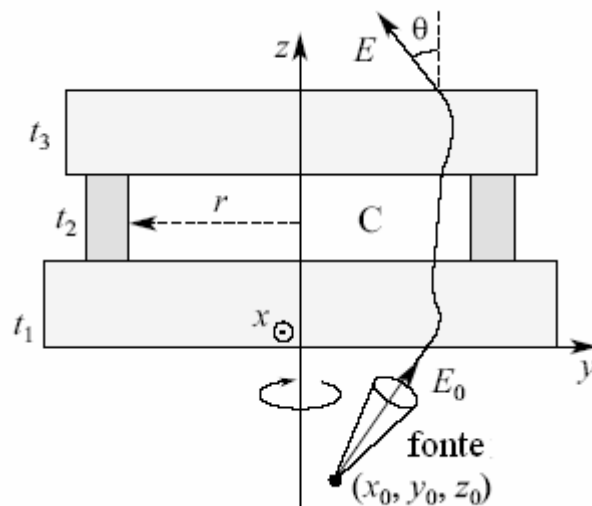


Figura 2.4: Exemplo de geometria usada no PENCYL.

Este programa fornece informações detalhadas do transporte e deposição de energia, incluindo distribuição angular e de energia de partículas emergentes, distribuição em profundidade de dose e carga depositada, distribuição de energia

depositada em materiais selecionados e distribuição bidimensional de dose e carga depositada em materiais selecionados.

2.3.3 Programa PENDOSES

Este programa MAIN é um exemplo de simulação com geometrias complexas, formadas por superfícies quadráticas. Ele considera uma fonte puntual de partículas primárias na posição $\hat{r}_0 = (X0, Y0, Z0)$ que emite partículas em direções uniformemente distribuídas em um cone com semiabertura SALPHA e eixo central na direção (STHETA, SPHI), ou seja, a mesma distribuição de direções do programa PENCYL. A geometria do sistema é descrita através do programa PENGEOM, descrito na próxima seção.

O programa PENDOSES calcula a energia total depositada em cada corpo por partícula primária. Com algumas modificações, ele também pode fornecer a distribuição de probabilidade da energia depositada em corpos selecionados ou grupo de corpos. Qualquer futuro usuário do PENELOPE deve familiarizar-se com os detalhes de programação do PENDOSES antes de construir sua própria aplicação do PENELOPE. (Salvat *et al.*, 2003).

2.3.4 Programa PENGEOM

Simulações com o código PENELOPE que envolvam sistemas com geometrias complexas são efetuadas com o auxílio do pacote geométrico PENGEOM. Com ele pode-se descrever qualquer sistema material constituído por corpos homogêneos limitados por superfícies quadráticas. Estas são definidas através de sua equação geral na forma reduzida:

$$F_r(x, y, z) = I_1x^2 + I_2y^2 + I_3z^2 + I_4z + I_5 = 0 ,$$

onde os coeficientes I_n ($1 < n < 5$) podem assumir apenas os valores -1 , 0 ou 1 . Notemos que as superfícies quadráticas reduzidas têm simetria em relação ao eixo z . A figura 2.5 mostra as superfícies quadráticas os coeficientes ou índices que serão usados no arquivo de definição da geometria, explicado a seguir. Estes são construídos através da definição de superfícies quadráticas, corpos delimitados por elas e módulos, que são regiões contendo um ou mais corpos. A tabela 2.1 mostra um arquivo de definição de um simulador de paciente em formato de paralelepípedo com dimensões de 20cm x 20cm x 40cm.

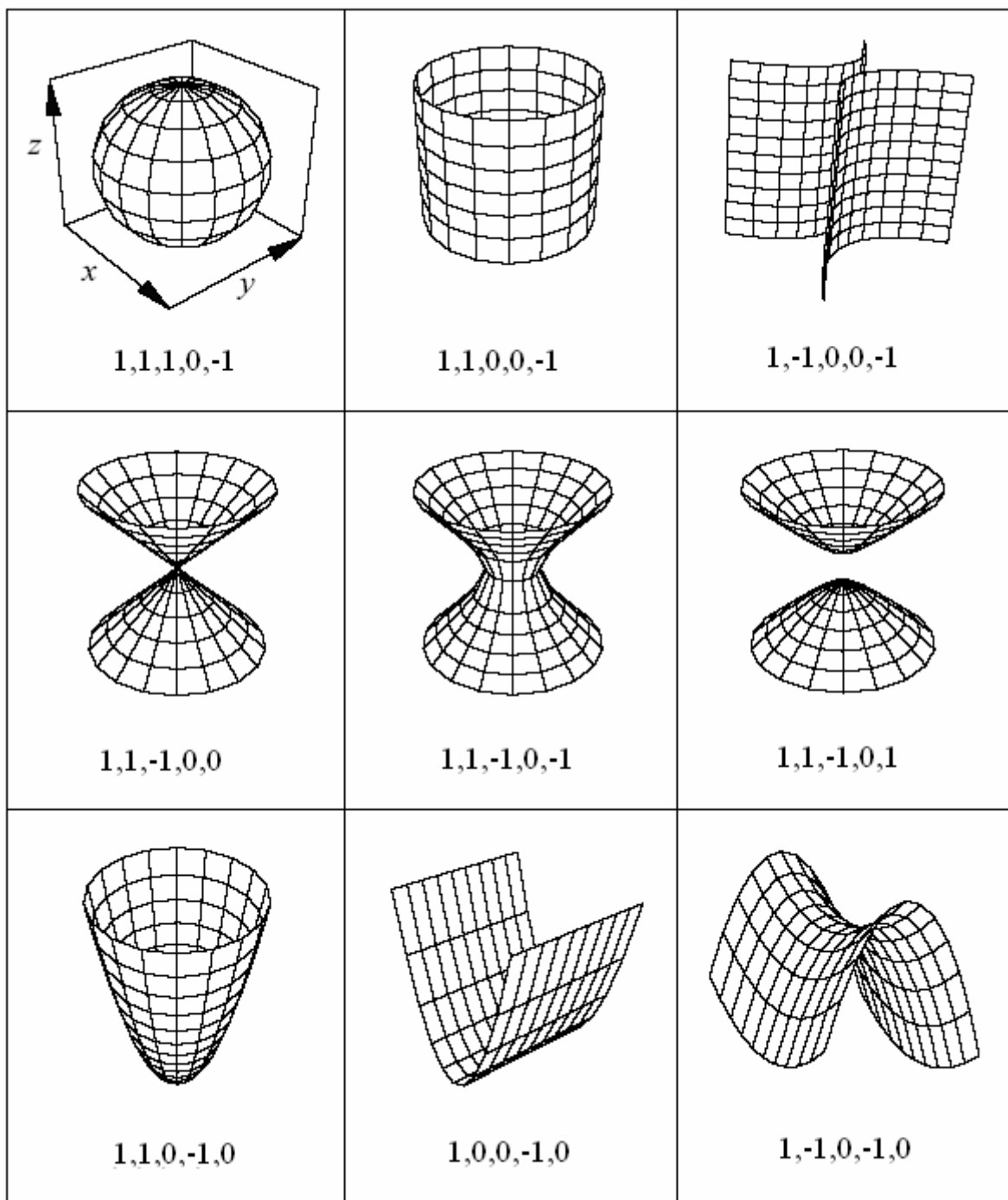


Figura 2.5: Superfícies quadráticas usadas no Pengeom (adaptada de Salvat *et al.*, 2003).

As formas geométricas construídas podem ser visualizadas com auxílio dos programas GVIEW2D e GVIEW3D, que são distribuídos no pacote PENELOPE. Estes visualizadores são um tanto rudimentares mas muito úteis no processo de construção de geometrias complexas. O cubo definido na tabela 2.1 pode ser visto na figura 2.6 com o auxílio do programa GVIEW2D. A figura 2.7 mostra um exemplo de geometria complexa construída com o PENGEOM, um fantoma composto por 15 materiais diferentes apresentado como exemplo no pacote de distribuição PENELOPE.

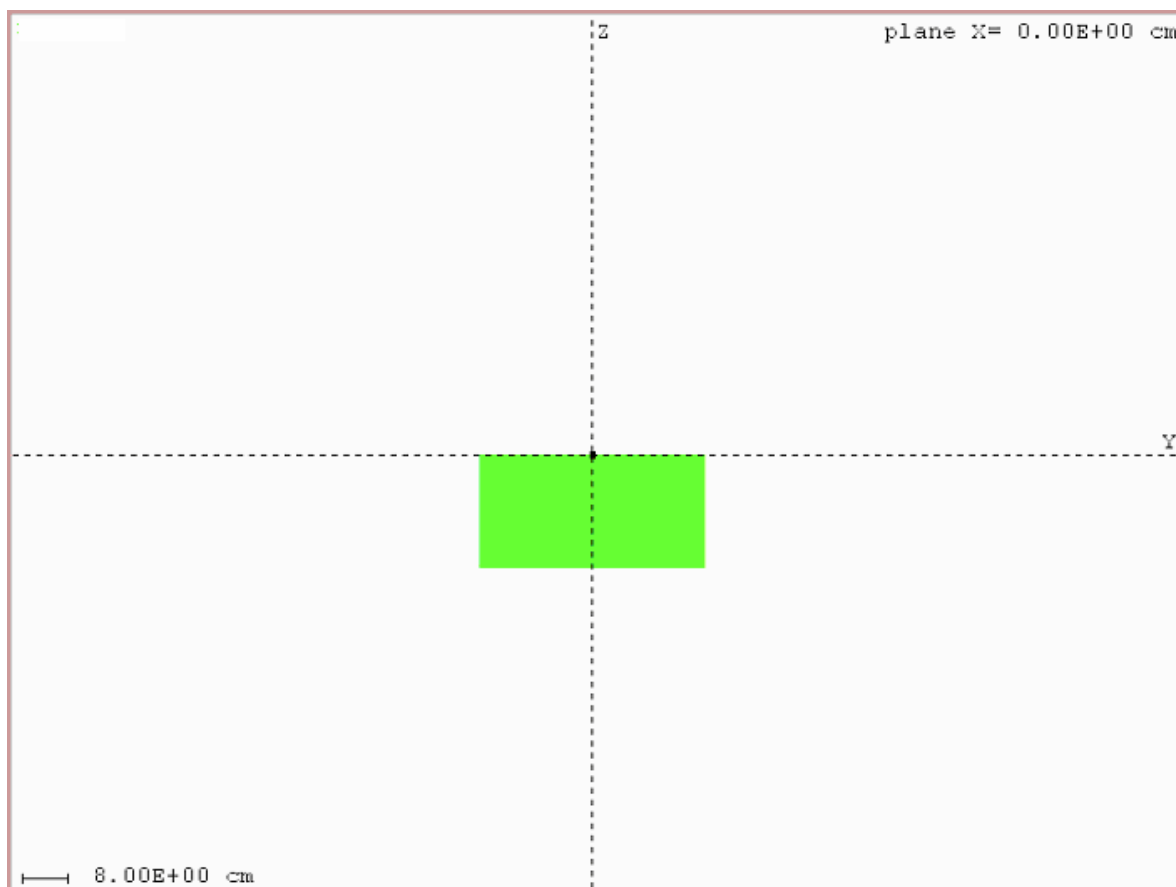


Figura 2.6: Fantoma em formato de paralelepípedo de 40cmx 40cmx 20cm construído com o programa PENGEOM.

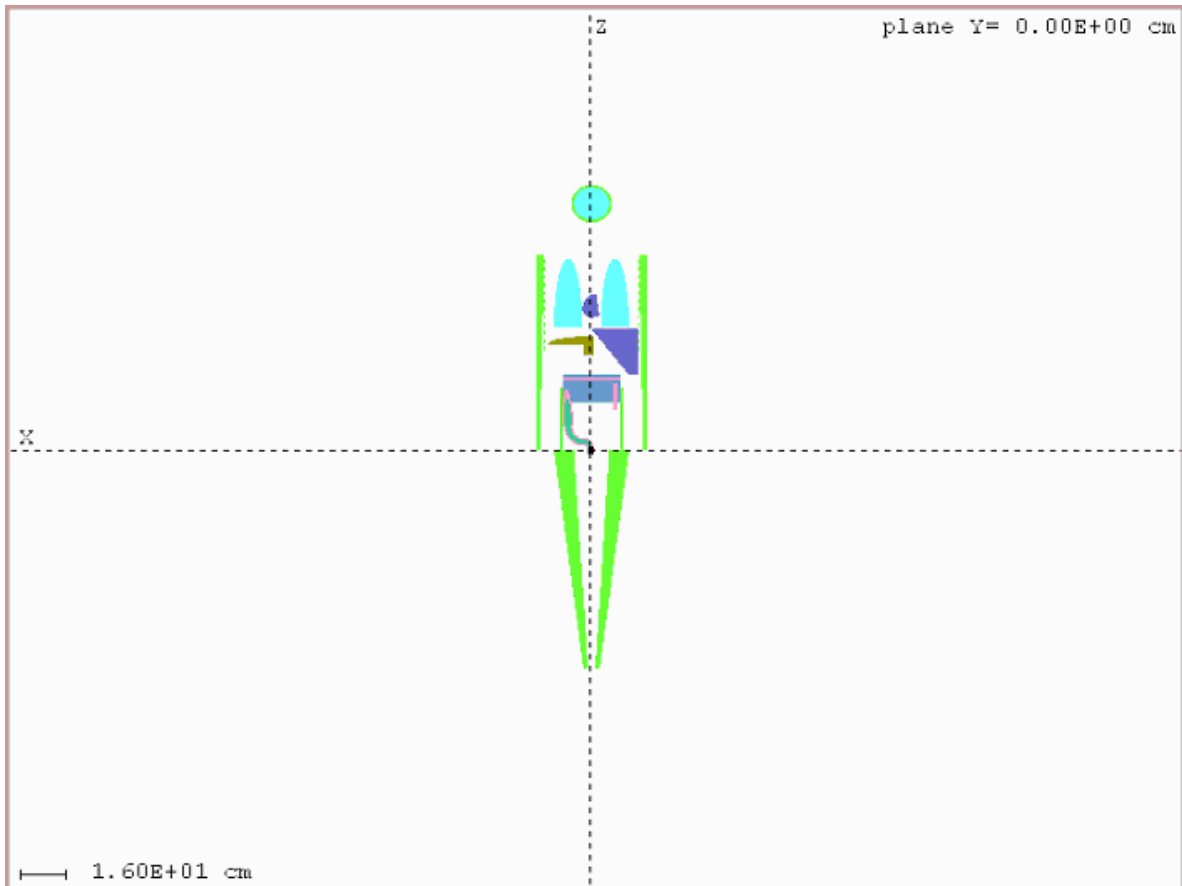


Figura 2.7: Simulador de paciente construído com o programa PENELOPE.

2.3.5 Programa SHOWER

O pacote de distribuição PENELOPE traz um aplicativo desenvolvido para ser uma ferramenta didática. Ele ilustra a trajetória de elétrons, pósitrons e fótons no interior de um bloco, mostrando graficamente os caminhos simulados na tela do computador. O material considerado pode ser qualquer um entre os 279 definidos no arquivo PDCOMPOS.TAB. A figura 2.8 apresenta o resultado da simulação com o programa SHOWER com os seguintes parâmetros:

Material: água

Partículas primárias: elétrons

Energia inicial: 1E7 eV

Energia de absorção para elétrons: 1E4 eV

Energia de absorção para fótons: 1E4 eV

Espessura do bloco: 10 cm

Número de elétrons simulados: 50

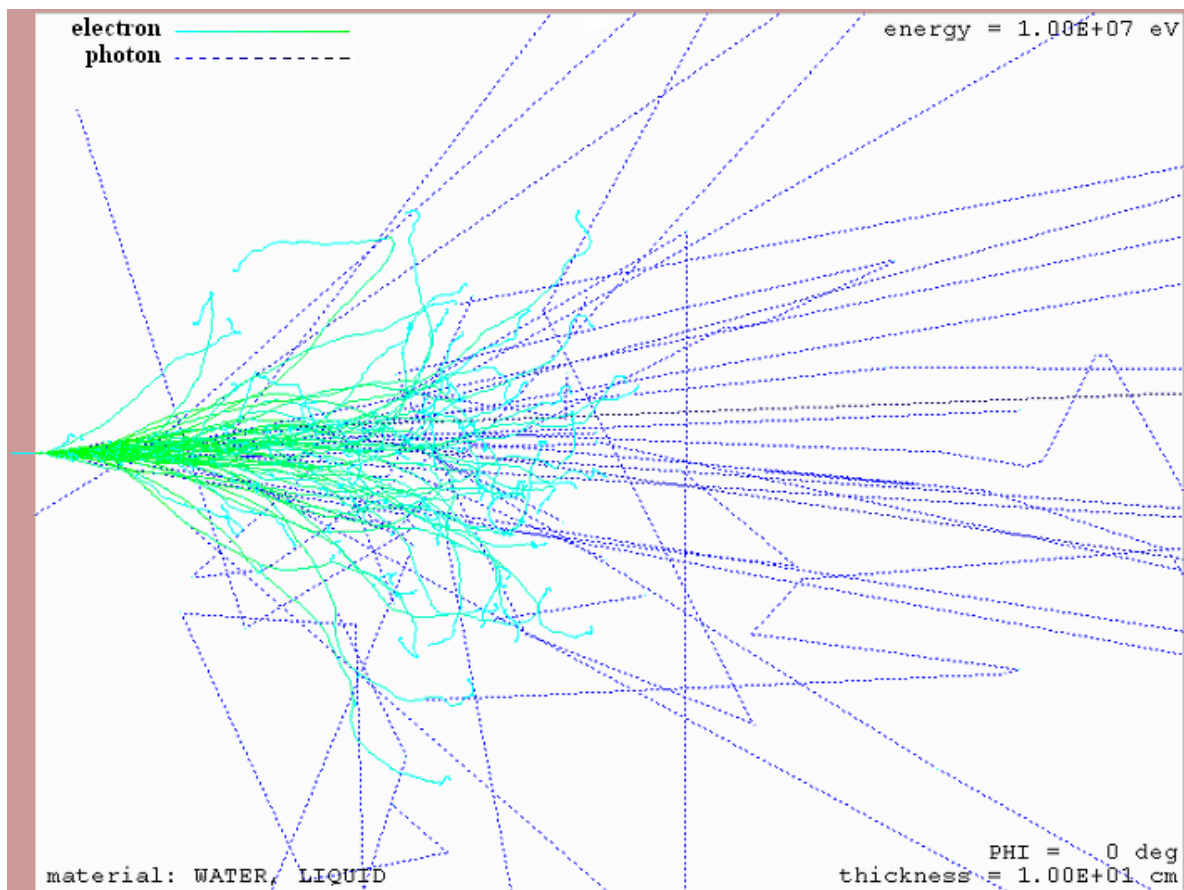


Figura 2.8: Simulação com o programa SHOWER.

2.4 Ampola geradora de raios-x

A figura 2.9 é um diagrama de uma ampola de raios-x diagnóstico. Ele contém um cátodo com um filamento que serve como fonte de elétrons. O ânodo pode ser fixo ou giratório. O ânodo e cátodo estão contidos em um tubo evacuado de modo a evitar colisões dos elétrons com moléculas de gás. O tubo é envolvido pelo cabeçote que o protege e garante a blindagem, evitando vazamento de radiação. O cabeçote oferece um banho de óleo que isola eletricamente o tubo e ajuda a resfria-lo. Os raios-x produzidos saem da ampola através de uma janela de berílio, que os filtra parcialmente. O filamento no cátodo fica sujeito a uma voltagem perto de 10V e uma corrente da ordem de 4A. A nuvem eletrônica que forma-se em torno do filamento é então colimada e acelerada pela diferença de potencial aplicada entre ânodo e cátodo, que geralmente varia de 80 keV a 120 keV em radiologia convencional. Ao atingir o ânodo, geralmente de tungstênio, os elétrons sofrem diversos efeitos (ver capítulo 1) que resultam na produção de raios-x com energias que vão de zero até a energia máxima dos elétrons incidentes no alvo (ânodo). Os raios-x que efetivamente atravessam o paciente e impressionam o filme são aqueles com energias maiores que 20 keV. Fótons com energias menores têm como único efeito depositar dose no paciente. Para eliminar esta radiação de baixa energia utilizam-se filtros que atenuam esta radiação indesejável. Em radiografias convencionais usa-se geralmente o alumínio para este fim.

Como o contraste é de importância fundamental em imagens radiológicas, é importante que a fonte de radiação seja o mais próximo possível de uma puntual. Como as fontes usadas são extensas, o pequeno ângulo do ânodo faz com que o feixe que sai da ampola comporte-se mais com o que seria produzido por uma fonte puntual. Este

recurso é conhecido como princípio do foco linear, e está esquematizado na parte inferior da figura 2.9.

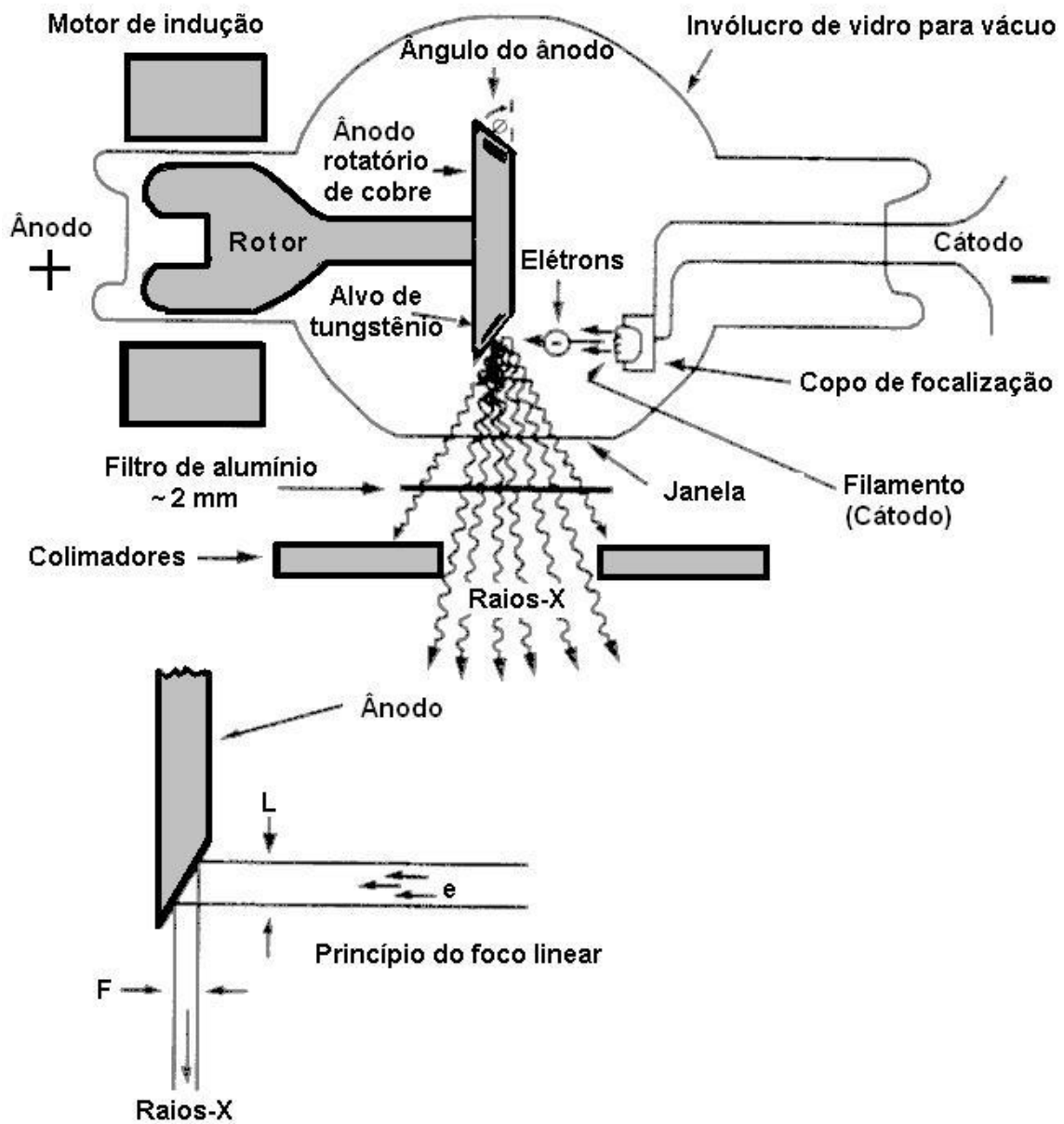


Figura 2.9: Ampola geradora de raios-x (adaptado de Huda e Slone, 1995).

2.5 Arranjo experimental simulado

Para que pudéssemos assegurar a confiabilidade do código PENELOPE na simulação da produção de raios-x, resolvemos reproduzir uma configuração para a qual os espectros de energia estão publicados na base de dados eletrônica IPEM *report* número 78. Este catálogo fornece dados úteis para aplicações em radiologia e mamografia. Baseado no método semi-empírico de Birch e Marshall (1979), sua primeira versão foi publicada por Birch *et al.* (1997). A versão atual (Cranley *et al.*, 1997) contém um conjunto de espectros de raios-x maior que a versão anterior. Esta mesma configuração foi usada por Ay *et al.*, 2004, 2005, que simula o processo de produção de fótons por feixes eletrônicos incidindo no ânodo com energias entre 80 keV a 140 keV utilizando o código para simulação Monte Carlo MCNP4. Desta forma pudemos comparar nossos resultados com os obtidos por estes dois processos.

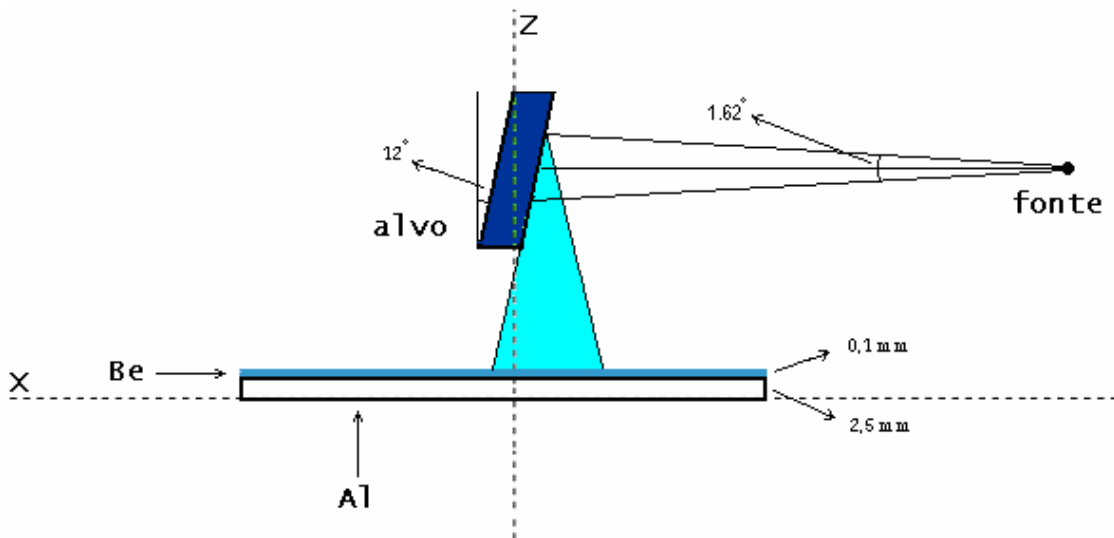


Figura 2.10: Arranjo experimental simulado

As simulações com o código PENELOPE foram realizadas basicamente de duas formas. Na primeira simulamos o espectro de raios-x produzidos por um alvo de tungstênio, filtrado por uma janela de berílio de 1 mm de espessura e um filtro de alumínio de 2,5 mm. No segundo tipo de simulação adicionamos a esta configuração uma camada de ar de 75 cm de espessura e um simulador de paciente, um paralelepípedo de água de dimensões 40 cm x 40 cm x 20 cm. A figura 2.10 mostra as principais dimensões utilizadas. O alvo tem 0,8 cm de espessura e ângulo de 12° . A área de detecção simulada foi de 40 cm^2 e sua distância ao ponto focal é de 7,5 cm. A distância entre a fonte e o ânodo é de 10 cm e o ângulo de abertura da fonte eletrônica foi fixado em $1,62^\circ$, de forma que produza uma mancha focal de 1,2 mm (projeção na direção do feixe primário do semieixo maior da elipse originada pela intersecção do cone formado pela região de incidência eletrônica com o plano do alvo). Os parâmetros de simulação utilizados foram $E_{ABS} = 1 \text{ keV}$, $W_{cc} = 10 \text{ keV}$, $W_{cr} = 1 \text{ keV}$ e $C1 = C2 = 0,1$. A resolução em energia foi de 0,5 keV. O número de histórias primárias simuladas foi de $4,5 \times 10^7$. O computador utilizado foi um ATLON XP 2000 X e o tempo de simulação ficou entre 40 e 50 horas, dependendo das energias dos elétrons incidentes. No primeiro arranjo as energias do feixe eletrônico incidente consideradas foram 60, 80, 100, 120 e 140 keV. No segundo arranjo utilizamos um feixe eletrônico incidindo com 120 keV.

O programa GVIEW2D permite que visualizemos a geometria definida para o cálculo com o PENELOPE. A figura 2.11 apresenta o arquivo utilizado para o cálculo dos espectros e do efeito anódico, enquanto a figura 2.12 mostra adicionalmente o bloco de ar e um simulador de paciente utilizados na consideração da atenuação do feixe de raios-x pelo ar e a energia depositada no paciente.



Figura 2.11: Geometria utilizada para a simulação do espectro.

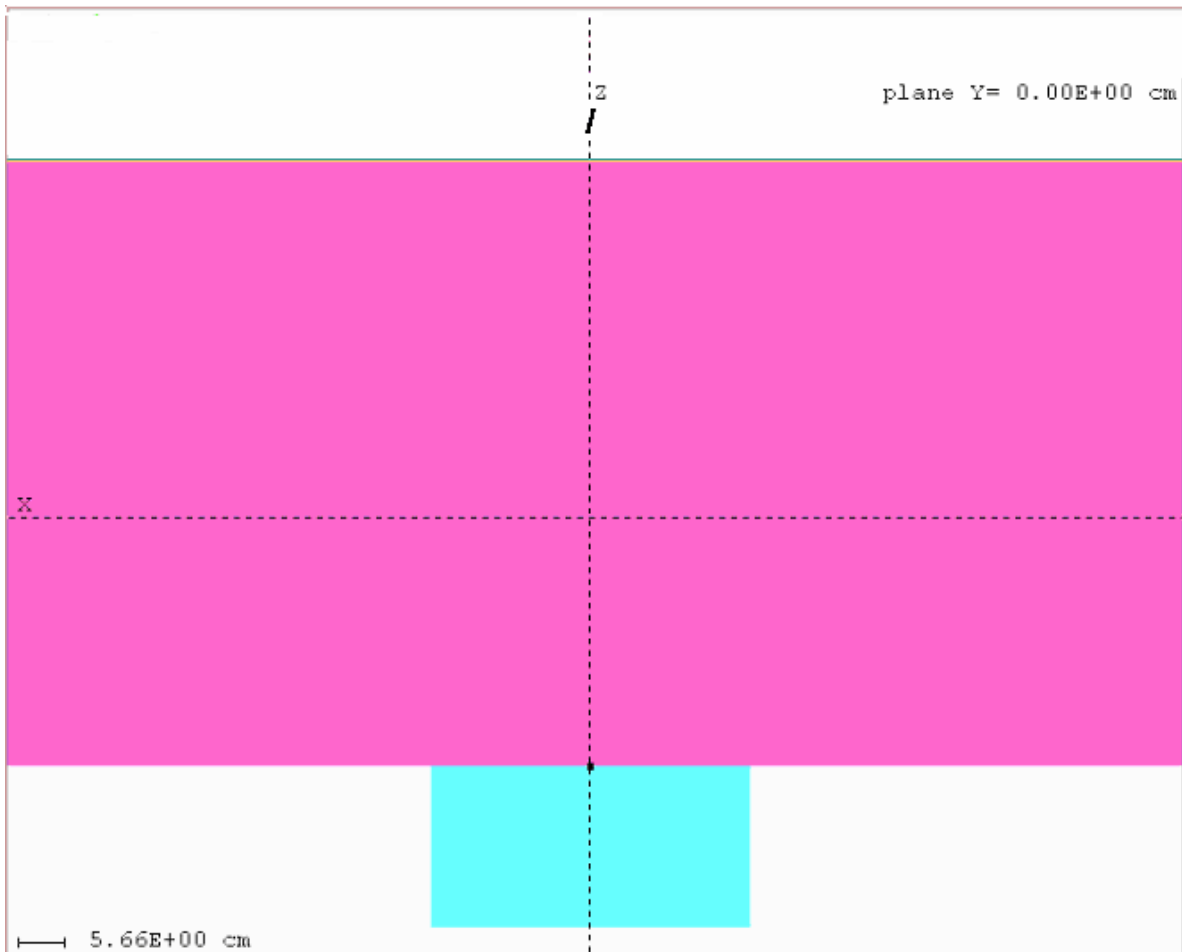


Figura 2.12: Simulação com bloco de ar e fantoma.

2.6 Edição do programa MAIN

As geometrias consideradas em nosso problema são mais complexas que as admitidas no programa PENSLAB e diferentes das indicadas para o cálculo com o PENCYL. Deste modo o nosso programa MAIN deve ser tal que leve em consideração as geometrias através das sub-rotinas do programa PENGEO. O programa MAIN distribuído no pacote PENELOPE que mais se aproxima de nossas necessidades é o

PENDOSESES. Este programa calcula apenas a dose depositada em cada corpo envolvido por partícula primária incidente. Como ele não diz nada em sua saída sobre o espectro de energia ou distribuição espacial de fóton, a modificação que fizemos consistiu em:

- (i) Encontrar a variável que armazena os valores da energia e posição das partículas.
- (ii) Verificar em uma área escolhida onde se quer simular o espectro de energia incidente, se a partícula simulada é um fóton.
- (iii) Armazenar em um vetor as contagens de fótons de cada energia que chegam a esta região.
- (iv) Armazenar em um arquivo a posição de cada fóton ao chegar à região considerada.
- (v) Gerar arquivos de saída com o espectro de raios-x e as posições dos fótons que chegam à área considerada.

Como partimos do programa PENDOSESES, a dose depositada em cada corpo por partícula primária também é calculada. A posição dos fótons é considerada para um estudo qualitativo do efeito anódico. Espectro de energia, efeito anódico, atenuação do feixe pelo ar e a energia total depositada nos corpos por partícula primária são discutidos no capítulo seguinte.

3 Resultados e discussões

Os resultados obtidos nas simulações com o código PENELOPE estão plotados nas figuras 3.1(a) a 3.1(e). Nestes gráficos estão também plotados os dados publicados no IPEM *report* número 78. As figuras mostram que os resultados da simulações com o código PENELOPE reproduzem os dados simulados com o método semi-empírico apresentados na publicação citada para todas as energias dos feixes incidentes consideradas.

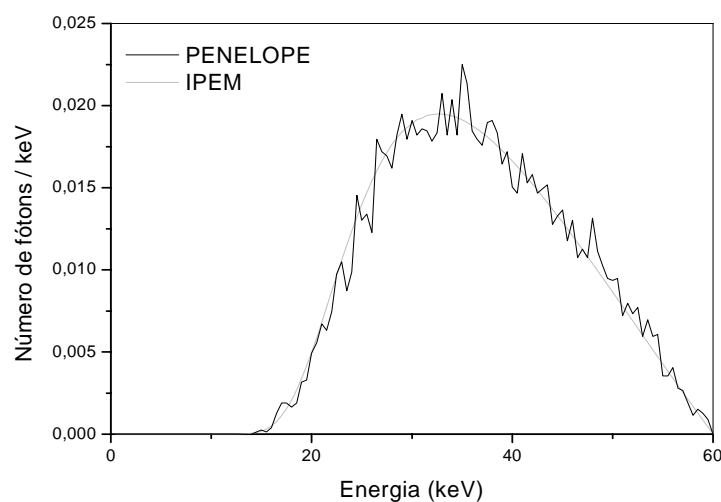


Figura 3.1 (a): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 60 keV.

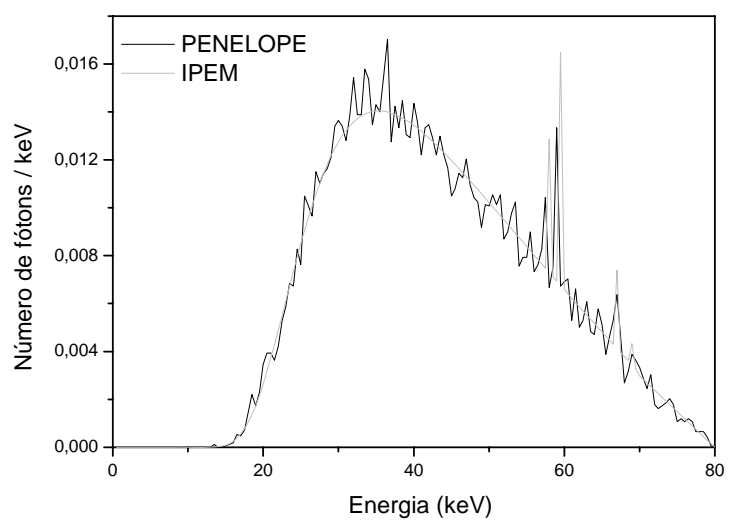


Figura 3.1 (b): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 80 keV.

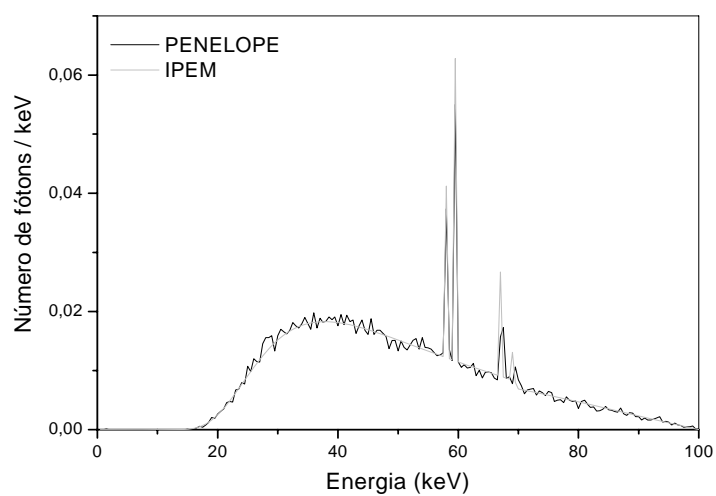


Figura 3.1 (c): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 100 keV.

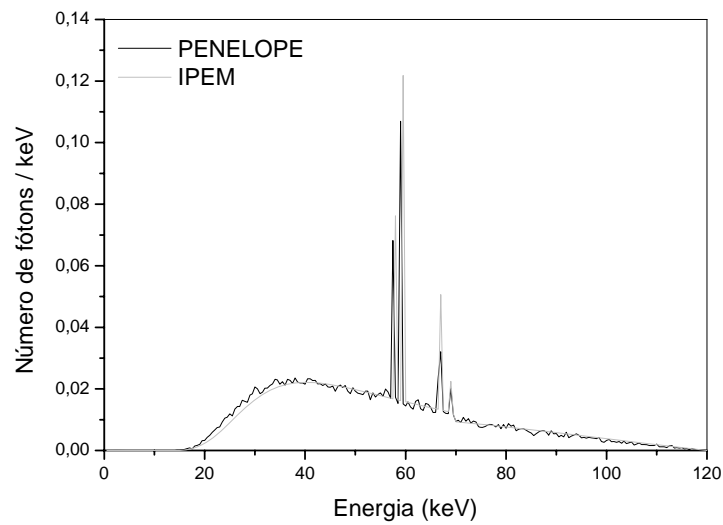


Figura 3.1 (d): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 120 keV.

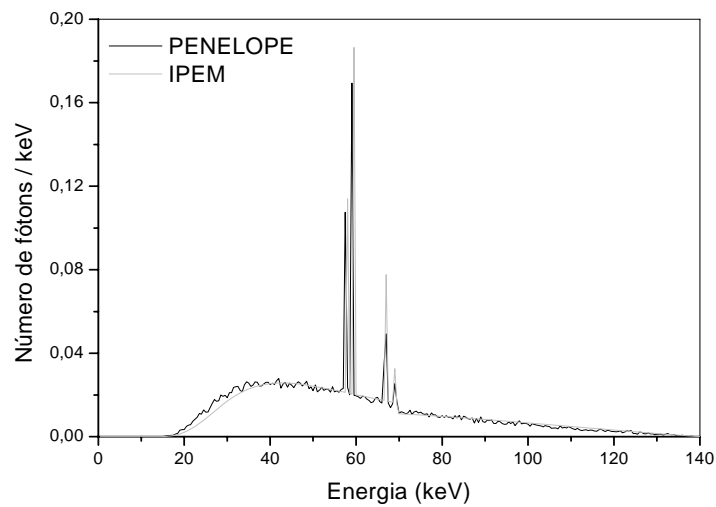


Figura 3.1 (e): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 140 keV.

Nas figuras 3.2(a) a 3.2(d) estão plotados os resultados dos cálculos com o código PENELOPE e os resultados simulados com o código de simulação de Monte Carlo MCNP4 por Ay *et al.*, 2004.

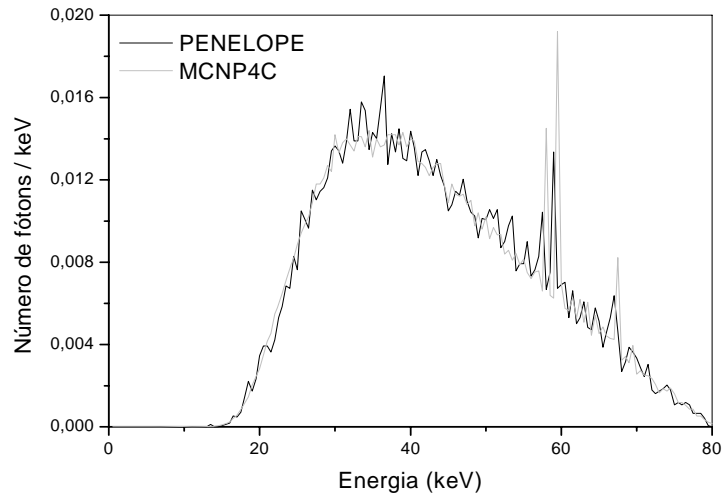


Figura 3.2 (a): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 80 keV.

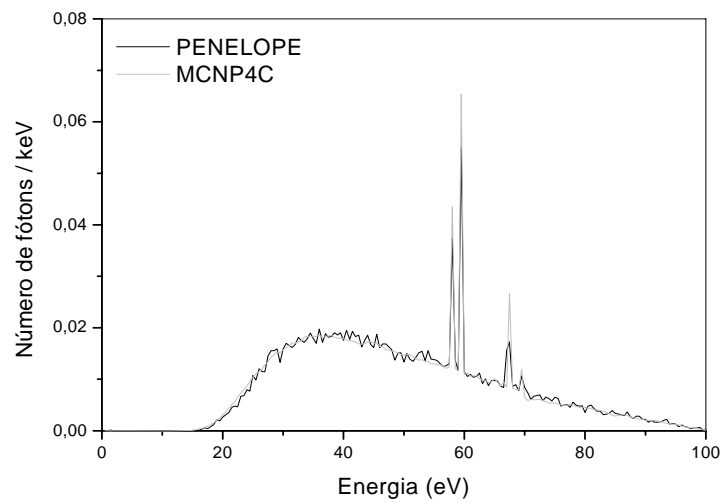


Figura 3.2 (b): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 100 keV.

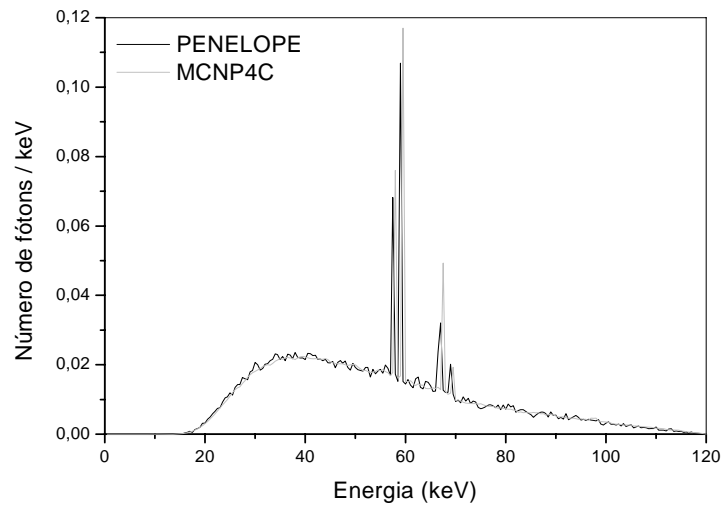


Figura 3.2 (c): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 120 keV.

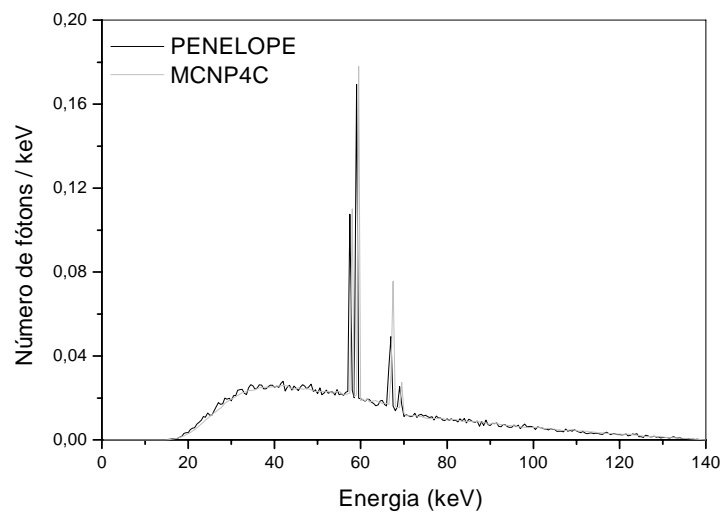


Figura 3.2 (d): Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 140 keV.

Um fato claramente constatado é que nos resultados obtidos com o código PENELOPE a flutuação estatística é maior que nas simulações com o MCNP4C. Como

trata-se de método de Monte Carlo, estas flutuações diminuem com o número de histórias simuladas e não são significativas. Em nosso caso o número de histórias simuladas foi de $4,5 \times 10^7$ enquanto que o grupo do Prof. Mohamad Ay simulou $4,0 \times 10^7$ partículas primárias. No entanto, em seu trabalho foi usada uma técnica de otimização das simulações no código MCNP, semelhante à redução variacional no código PENELOPE, chamada contagem de detector pontual, sem a qual seriam necessários da ordem de 10^9 elétrons incidentes para que fossem obtidos os mesmos resultados.

Outro comportamento observado é que esta flutuação estatística é maior para energias menores do feixe de elétrons incidente no alvo de tungstênio. Como a flutuação estatística depende do número de histórias simuladas, uma possível explicação para este fato seria o a hipótese de que menos fótons chegam à região de interesse para energias menores do feixe incidente. Esta hipótese é confirmada pela figura 3.3, que apresenta a fluência (número de fótons por unidade de área) em função da energia do feixe de elétrons incidente. Este comportamento da fluência evidencia a filtragem do feixe de fótons produzido. A incidência de elétrons menos energéticos no ânodo produz mais fótons também de baixa energia, mais facilmente atenuados tanto no alvo de tungstênio como na janela de berílio e no filtro de alumínio. Isto assegura uma menor fluência para fótons de menor energia.

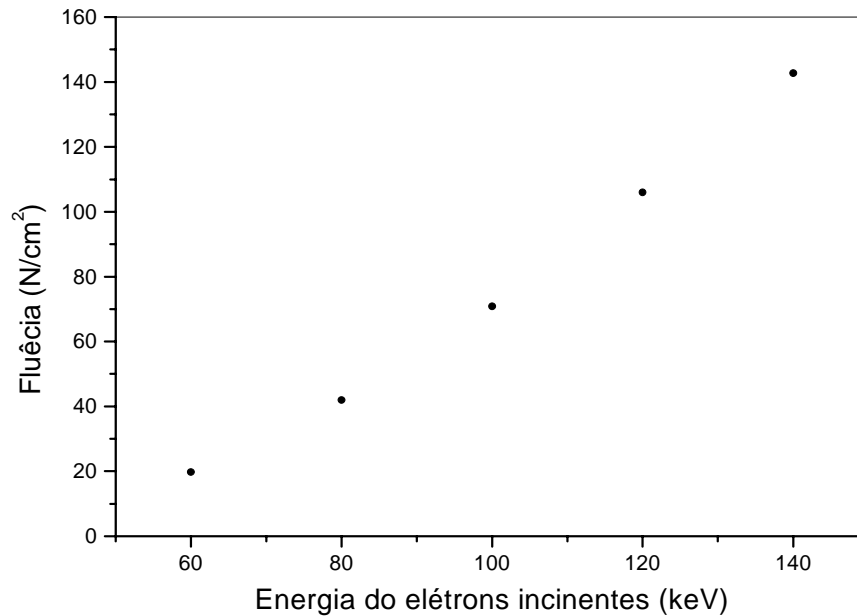


Figura 3.3 : Fluência em fótons em função da energia dos elétrons incidentes.

Ainda com esta configuração geométrica, construímos figuras que representam a posição bidimensional dos fótons ao atravessarem o filtro de alumínio. Estes diagramas de fluência permitem-nos observar, ainda que qualitativamente, o efeito anódico. Os gráficos 3.4 (a) e 3.4 (b) mostram estas figuras para energias de elétrons incidentes de 60 e 140 keV. Nas duas figuras fica evidente a variação na fluência, que é maior na região logo abaixo do ânodo (próxima a $x = y = 0$) e vai diminuindo da direção x na medida que nos afastamos em direção ao cátodo. Vemos que a fluência é simétrica na direção x , o que deveríamos esperar pela geometria do problema. A fronteira de fluência próxima a $x = 0$ coincide com a intersecção do plano do ânodo com o de plano da contagem de fótons. Podemos notar ainda que alguns fótons atravessam a parte inferior do alvo e chegam à região mais clara dos x positivos.

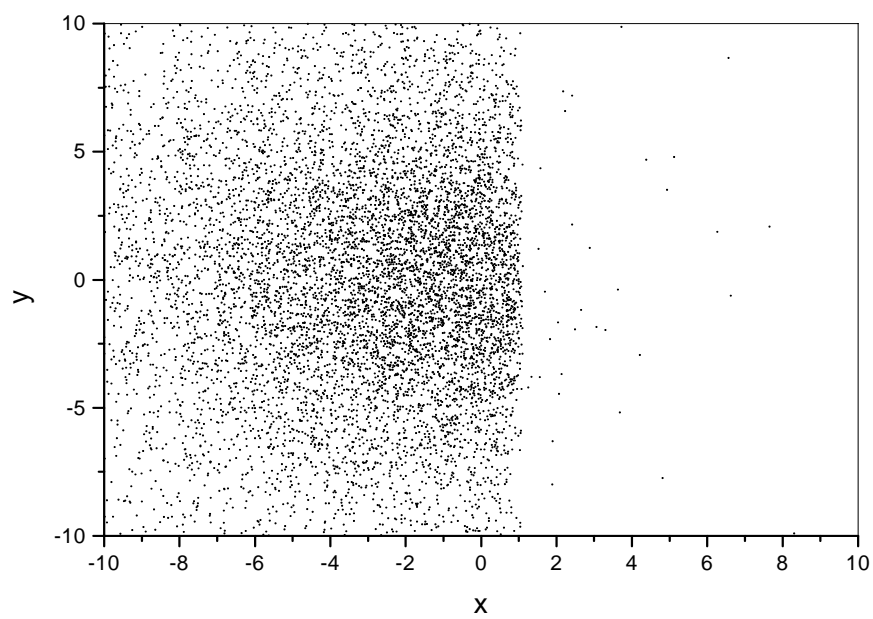


Figura 3.4 (a): Diagrama de fluência em fótons para elétrons incidentes com energia de 60 keV.

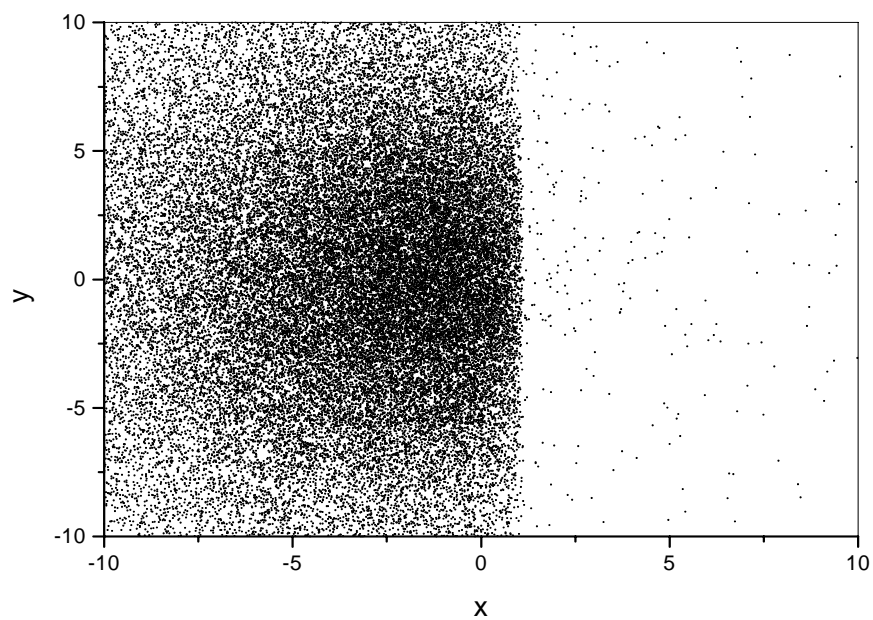


Figura 3.4 (b): Diagrama de fluência em fótons para elétrons incidentes com energia de 140 keV.

No segundo tipo de simulação efetuado foi adicionado ao primeiro arranjo considerado uma camada de ar de 75 cm de espessura e um simulador de paciente, um paralelepípedo de água de dimensões 40cm x 40 cm x 20 cm abaixo do bloco de ar. Foi então calculado o espectro de energia incidente na superfície do simulador (final do bloco de ar) para partículas primárias incidentes com 120 keV. O resultado é mostrado na figura 3.5 juntamente com o espectro simulado sem a presença do ar. Não percebemos diferença significativa entre os dois espectros.

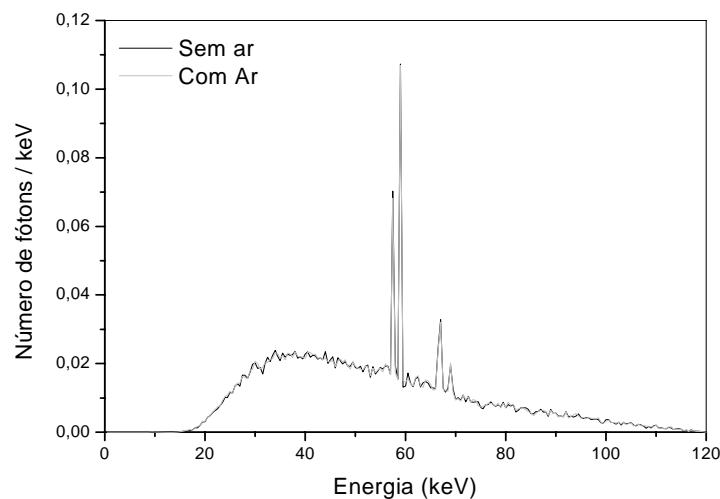


Figura 3.5: Espectro de raios-x com e sem ar para elétrons incidindo com 120 keV.

Para entendermos melhor este comportamento, realizamos uma simulação paralela onde utilizamos o programa PENSLAB. Como explicado no capítulo 2, este programa efetua a simulação de partículas incidentes em blocos de materiais definidos. Fizemos então incidir não elétrons mas fótons em um bloco de ar da espessura

considerada na simulação anterior a fim de estudar a atenuação dos mesmos pela camada de ar.

A figura 3.6 exibe a fração N/N_0 entre o número N de fótons que atravessam o bloco de ar e o número N_0 dos fótons nele incidentes. Foram incididos raios-x entre 20 e 120 keV. Notamos que para a grande maioria dos fótons a atenuação do ar é desprezível, tendo ela uma pequena expressão para energias menores que 40 keV. Esta atenuação, no entanto, não teve efeito considerável na forma do espectro mesmo para a região de energias mais baixas como constatamos na figura 3.5.

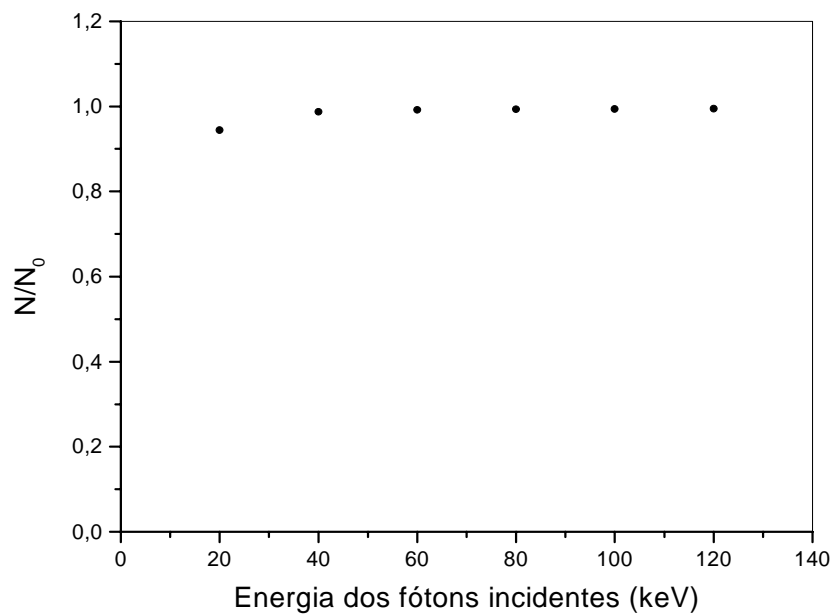


Figura 3.6: Atenuação dos fótons produzidos pela camada de ar.

Com relação às linhas características de emissão, notamos um ligeiro descolamento de suas posições relativas, tanto dos resultados com o código PENELOPE

quanto com o MCNP4C em relação aos dados do IPEM *report* número 78. As aproximações feitas nos cálculos das seções de choque, no caso do PENELOPE, poderiam levar a estes deslocamento. Por outro lado as diferenças observadas estão todas dentro da precisão permitida pelo intervalo de energia adotado na construção dos espectros, que foi de 0,5 keV. Efetuamos então uma simulação com intervalo de energia dos fótons igual a 0,1 keV para elétrons incidindo a 100 keV, mostrado na figura 3.5. Os valores encontrado para a energia dos fótons característicos concordam com os valores experimentais de Storm e Israel, 1970, com precisão de 0,1 keV (com exceção da linha $K_{\beta 2}$ que excede em 1,19 keV) como mostra a tabela 3.1. Nela notamos também que as incidências relativas dos picos característicos simulados pelo PENELOPE e medidos por Storm e Israel estão bastante próximas.

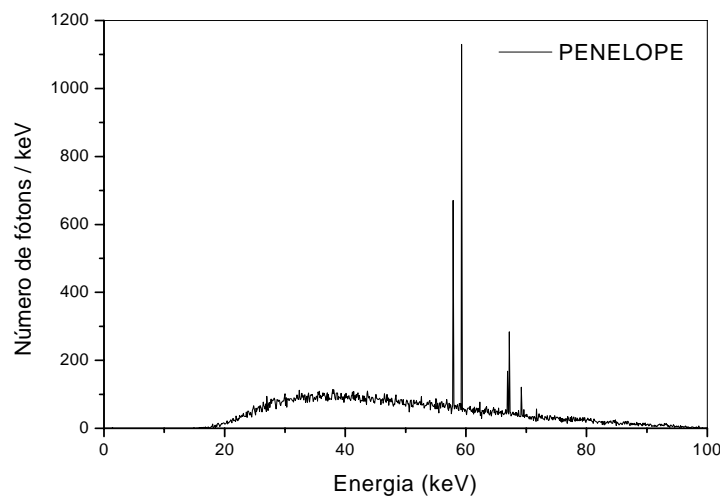


Figura 3.7: Espectro de raios-x para elétrons primários incidindo com 100 keV e intervalo de energia de 0,1 keV.

Linha característica	PENELOPE	Incidência Relativa	Medidas	Incidência Relativa
$K_{\alpha 1}$	59,3	100	59,321	100
$K_{\alpha 2}$	57,9	59	57,984	58
$K_{\beta 1}$	67,2	25	67,244	21
$K_{\beta 2}$	69,2	10	69,081	7
$K_{\beta 3}$	66,9	14	66,950	11

Tabela 3.1: Linhas de emissão características do tungstênio simuladas e medidas.

Corpo	Energia Depositada (eV)
Ânodo	$(6,53 \pm 0,01) \times 10^4$
Janela de Be	$(2,57 \pm 0,01) \times 10^4$
Filtro de Al	$(7,36 \pm 0,01) \times 10^{-1}$
Bloco de Ar	$(7,31 \pm 0,68) \times 10^{-1}$
Simulador	$3,34 \pm 0,18$

Tabela 3.2: Energia média depositada em cada corpo por partícula primária incidindo com energias de 120keV.

O programa MAIN que editamos calcula a energia depositada por partícula primária em todos os corpos envolvidos. Os resultados para a simulação com o simulador de paciente e o bloco de ar para energia incidente de 120 keV encontram-se na tabela 3.1.

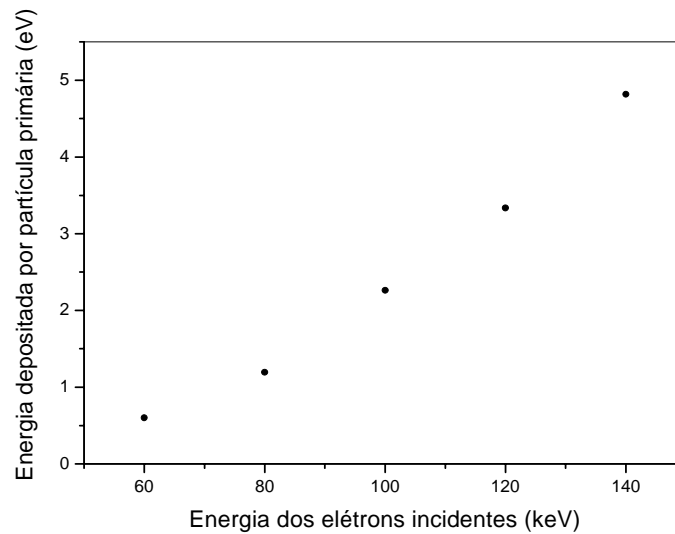


Figura 3.8: Energia média depositada no simulador por partícula primária incidente no ânodo.

Finalmente calculamos a energia depositada no simulador para energias dos elétrons incidentes de 60 a 140 keV. A figura 3.8 exhibe estes valores. Notamos que a energia depositada por partícula primária incidente, assim como a fluência, aumenta com a energia das partículas primárias, o que está de acordo com o argumento anterior de que fótons de maior energia chegam em maior número ao simulador.

4 Conclusões

Nosso objetivo de sistematizar uma ferramenta computacional que simule a produção de raios-x para uso diagnóstico foi atingido. Os resultados obtidos em nossas simulações concordam com os resultados do IPEM *report 78* e com os resultados simulados por Ay *et al.*, (2004). Os espectros de energia obtidos com o código PENELOPE não apresentam diferenças em relação aos resultados simulados com o código MCNP4C. Em relação aos dados do IPEM *report 78*, observamos uma pequena diferença na região de baixas energias dos espectros com energia máxima de 120 e 140 keV. Os fótons desta região do espectro não contribuem significativamente para a formação da imagem radiológica. No entanto depositam dose no paciente e por isso são importantes sob o ponto de vista do controle de qualidade do serviço radiológico. Neste aspecto consideramos necessário um estudo mais aprofundado dos parâmetros utilizados nas simulações. A energia média depositada no fantoma e demais corpos envolvidos, a atenuação do ar e o efeito anódico foram calculados para mostrar algumas possibilidades de aplicação do código PENELOPE. Nosso objetivo aqui foi realizar uma análise qualitativa destes fenômenos, o qual consideramos também atingido.

O código PENELOPE mostrou-se eficaz na simulação dos raios-x produzidos na grande maioria dos casos, e desta forma podemos considera-lo uma ferramenta confiável. Uma característica marcante do programa é a possibilidade que oferece de que geometrias diversas e complexas sejam consideradas. Deste modo é possível como continuidade deste trabalho a simulação com o código PENELOPE de situações que envolvam a dose em profundidade depositada no paciente, a blindagem da sala de diagnósticos ou a dose depositada nos profissionais envolvidos na rotina. Outra possibilidade de continuação do trabalho realizado seria empregar o código PENELOPE

na simulação da produção de raios-x utilizados em mamografias. Neste tipo de procedimento médico são utilizados materiais e energias diferentes dos empregados na produção de raios-x radiográficos.

Uma característica negativa deste método é o tempo computacional necessário às simulações, que aumenta com a complexidade do problema considerado. Entretanto, considerando-se as dificuldades envolvidas na determinação experimental das grandezas de interesse em radiodiagnósticos, o método de Monte Carlo é uma ferramenta bastante útil na predição destas grandezas, e o código PENELOPE mostrou-se satisfatório na realização desta tarefa.

Podemos resumir as conclusões a que chegamos na implementação do código PENELOPE na simulação da produção de raios-x radiográficos enumerando seus aspectos positivos:

- é distribuído gratuitamente;
- pode ser implementado em plataforma Windows ou Linux;
- admite geometrias bastante complexas e torna possível a visualização das mesmas;
- permite uma grande liberdade na abordagem de problemas ao possibilitar que diversas grandezas físicas sejam avaliadas simultaneamente;
- demonstrou acurácia nos resultados simulados.

Em contrapartida algumas características do código PENELOPE e de sua implementação podem ser consideradas negativas:

- grande tempo de simulação e consideráveis recursos computacionais exigidos;
- pouca qualidade didática do manual, o que dificulta o aprendizado do método por parte do usuário sem que este participe de cursos específicos;
- escassez dos cursos citados no item acima;
- pequena quantidade de referências bibliográficas que discutam a aplicação do código PENELOPE a problemas envolvendo energias na faixa empregada em radiodiagnósticos.

Referências bibliográficas

Acosta, E.; Llovet, X.; Coleoni, E.; Salvat, F. Monte Carlo simulation of bremsstrahlung emission by electrons. *Applied. Physics. Letters* 80 (17) (2002).

Ay, M.R.; Shahriari, M.; Sarkar, S.; Adib, M.; Zaidi, H. Monte Carlo simulation of x-ray spectra in diagnostic radiology and mammography using MCNP4C, *Phys. Med. Biol.* 49 (2004) 4897-4917.

Ay, M.R.; Sarkar, S.; Shahriari, M.; Sardari, D.; Zaidi, H. Assessment of different computational models for generation of x-ray spectra in diagnostic radiology and mammography, *Med. Phys.* 32 (6) (2005) 1660-1675.

Baró, J.; Sempau, J.; Fernández-Varea, J. M.; Salvat, F. PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (100) (1995) 31-46.

Bearden, J. A. X-ray wavelengths. *Review of Modern Physics*, Melville 39 (1) (1967) 78-124.

Ben Omrane, L.; Verhaegen, F.; Chahed, N.; Mtimet, S.; An investigation of entrance surface dose calculations for diagnostic radiology using Monte Carlo simulations and radiotherapy dosimetry formalism. *Phys. Med. Biol.* 48 (2003) 1809-1824.

Berger, M. J.; Seltzer, S. M. *Monte Carlo Transport of Electrons and Positrons*. New York: eds. T. M. Jenkins, W. R. Nelson and A. Rindi (1988)

Bhat, M.; Pattison, J.; Bibbo, G.; Caon, M. Off-axis x-ray spectra: A comparison of Monte Carlo simulated and computed x-ray spectra with measured spectra. *Med. Phys.* 26 (1999) 303-309.

Bhat, M.; Pattison, J.; Bibbo, G.; Caon, M. Diagnostic x-ray spectra: A comparison of spectra generated by different computational methods with a measured spectrum. *Med. Phys.* 25 (1998) 114-120.

Birch, R.; Marchall, M. Computation of bremsstrahlung x-ray spectra and comparison with spectra measured with a Ge(Li) detector. *Phys. Med. Biol.* 24 (1979) 505-517.

Boone, J. M.; Seibert, J. A. An accurate method for computer generating tungsten anode x-ray spectra from 30 to 140 kV. *Med. Phys.* 24 (11) (1997) 1661-1670.

Brun, R; Bruyant, F.; Maire, M. McPherson, A. C.; Zancarini, P. "GEANT3", *Report DD/EE/84-1* (CERN, Geneva).

Campos, C. S. *Tese de doutorado: Determinação de seções de choque eficazes para a produção de raios-x induzidos por irradiação com feixe de elétrons em sólidos*. Porto Alegre: UFRG (2003).

Cranley, K.; Gilmore, B. J.; Fogarty, G. W. A.; Desponds, L. 1997 *IPEM Report &*: Catalogue of Diagnostic X-ray Spectra and Other Data* (CD-Rom Edition 1997) (Electronic Version prepared by D. Sutton) (York: The Institute of Physics and Engineering in Medicine (IPEM)).

Desclaux, J. P. A multiconfiguration relativistic Dirac-Fock program. *Computer Physics Communications* 9 (1) (1975).

Epp, E. R.; Weiss, H. Experimental Study of the Photon Energy Spectrum of Primary Diagnostic X-Rays. *Phys. Med. Biol.* 11 (2) (1966) 225-238.

Fewell, T. R.; Shuping, R. E. *Handbook of Computed Tomography X-Ray Spectra* (HHS Publication) (FDA). Washington DC: US Gov. Printing Office (1978) 81-8162

Fewell, T. R.; Shuping, R.E. Photon energy distribution of some typical diagnostic x-ray beams. *Med. Phys.* 4 (3) (1977) 187-197.

Green, M.; Cosslet, V. E. Measurements of K, L and M shell X-ray production efficiencies. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1 (1968) 425-436.

Halbleib, J. A.; Kensek, R. P.; Mehlhorn, T. A.; Valdez, G. D.; Seltzer, R. M.; Berger, M. J. "ITS version 3.0: the integrated TIGER series of coupled electron/photon Monte Carlo transport codes", *Report SAND91-1634* (Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM).

Huda, W.; Slone, R. M. *Review of Radiologic Physics*. Media: Lippincott Williams & Wilkins (1995).

ICRU 37. *Stopping Powers of electrons and positrons*. ICRU: Bethesda, M. D. (1984)

Johns, H. E.; Cunningham, J. R.; *The Physics of Radiology*. 4^a ed. Springfield: Charles C. Thomas (1983).

Kissel, L.; Quarles, C. A.; Pratt, R. H. Shape functions for atomic field *bremsstrahlung* from electrons of kinetic energy 1- 150 keV on selected neutral atoms $1 \leq Z \leq 92$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, San Diego: Academic Press 28 (1983) 381 – 460.

Kramers, H. A. On the theory of the x-ray absorption and of the continuous x-ray spectrum. *Philos. Mag.* 46 (1923) 836-871.

Kulkarni, R. N.; Supe, S. J. Monte Carlo calculations of mammographic x-ray spectra. *Phys. Med. Biol.* 29 (1984) 185-90.

Liljequist, D. A simple calculation of inelastic mean free path and stopping power for 50 eV-50 keV electrons in solids, *Journal of Physics D: Applied Physics* 16 (1983) 1567-1582.

Mayol, R.; Salvat, F. Cross sections for K-shell ionization by electron impact. *Journal of Physics B – Atomic Molecular and Optical Physics*. 23 (1990) 2117-2130.

McMaster, W.H.; Del Grande, N.K.; Mallett, J.H; Hubbell, J.H. Compilation of X-ray Cross Sections, Lawrence Livermore Lab., Report UCRL-50174, (1969).

Mercier, J. R. *et al.*, Modifi and benchmarking of MCNP for low-energy tungsten spectra. *Med. Phys.* 27 (2000) 2680-2687.

Mott, N. F.; Massey, H. S. W. *The Theory of Atomic Collision*. 3.ed. London: Oxford University Press (1965).

Ng, K. P.; Kwok, C. S.; Tang F. H. Monte Carlo simulation of x-ray spectra in mammography. *Phys. Med. Biol.* 45 (2000) 1309-1318.

O'Meara, J. M.; Chettle, D. R.; McNeill, F. E.; Prestwich, W. V.; Svensson, C. E. Monte Carlo simulations of source-excited *in vivo* x-ray fluorescence measurements of heavy metals. *Phys. Med. Biol.* 43 (1998) 1413-1428.

Perkins, S. T.; Cullen, D. E.; Chen, M. H.; Hubbell, J. H. Tables and grafs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL evaluated atomic data library (EADL), Z=1-100. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-50400 (30) (1991).

Rubinstein, R. Y. *Simulation and the Monte Carlo Method*. New York: John Wiley & Sons (1981).

Salvat, F.; Fernández-Varea, J. M.; Sempau, J. PENELOPE – *A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport*. France: OECD / NEA Data Bank, Issy-les-Moulineaux, France (2003).

Salvat, F. Simulation of electron multiple elastic scattering. *Radiation Physics Chemistry* 53 (1998) 247-256.

Stewart, R. D.; Wilson, W. E.; McDonald, J. C.; Strom, D. J. Microdosimetric properties of ionizing electrons in water: a test of the PENELOPE code system. *Phys. Med. Biol.* 47 (2002) 79-88.

Seltzer, S. M.; Berger, M. J. Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons. *Nuclear. Instruments and Methods in Physics Research Section B* 12 (1985) 95-134.

Storm, E.; Israel, H. I. Photons cross sections from 1 keV to 100 MeV. *Nuclear Data Tables* A7:566 (1970).

Tucker, D. M.; Barnes, G. T. Chakraborty D. P. Semiempirical model for generating tungsten x-ray spectra. *Med. Phys.* 18 (2) (1991) 211-218.

Verhaegen, F.; Castellano, I. A. Microdosimetric characterization of 28 kVp Mo/Mo, Rh/Rh, Rh/Al, W/Rh e Mo/Rh mammography x-ray spectra. *Radiat. Prot. Dosim.* 99 (2002) 393-396.

Verhaegen, F.; Nahum, A. E.; Van de Putte, S.; Namito, Y. Monte Carlo modelling of radiotherapy x-ray units. *Phys. Med. Biol.* 44 (1999) 1767-1789.

Walker, D. W. Relativistic effects in low energy electron scattering from atoms. *Advances in Physics* 20 (1971) 257-323.

Zaidi, H.; Sgouros, G. Therapeutic Applications of Monte Carlo Calculations in Nuclear Medicine. Bristol: Institute of Physics Publishing (2002).

Ye, S. J.; Brezovich, I. A.; Pareek, P.; Naqvi, S. A. Benchmark of PENELOPE code for low-energy photon transport: dose comparisons with MCNP4 e EGS4. *Phys. Med. Biol.* 49 (2004) 387-397.